

UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARANÁ

DENNER RIBEIRO MACHADO

APROXIMAÇÕES DO PROBLEMA DE GRAETZ ESTENDIDO PARA QUANTIFICAR A
DISPERSÃO E DEPOSIÇÃO DE MATERIAL PARTICULADO EM TUBOS

CURITIBA

2021

DENNER RIBEIRO MACHADO

APROXIMAÇÕES DO PROBLEMA DE GRAETZ ESTENDIDO PARA QUANTIFICAR A
DISPERSÃO E DEPOSIÇÃO DE MATERIAL PARTICULADO EM TUBOS

Dissertação apresentada como requisito parcial à obtenção
do título de Mestre em Engenharia Ambiental no Programa
de Pós-Graduação em Engenharia Ambiental, Setor de
Tecnologia, da Universidade Federal do Paraná.

Orientador: Prof. Dr. Emílio Graciliano Ferreira Mercuri.

CURITIBA

2021

Catálogo na Fonte: Sistema de Bibliotecas, UFPR
Biblioteca de Ciência e Tecnologia

M149a Machado, Denner Ribeiro
Aproximações do problema de Graetz estendido para quantificar a dispersão e deposição de material particulado em tubos [recurso eletrônico] / Denner Ribeiro Machado. – Curitiba, 2021.

Dissertação - Universidade Federal do Paraná, Setor de Tecnologia, Programa de Pós-Graduação em Engenharia Ambiental, 2021.

Orientador: Emílio Graciliano Ferreira Mercuri.

1. Funções Hipergeométricas. 2. Frobenius, Algebra de. I. Universidade Federal do Paraná.
II. Mercuri, Emílio Graciliano Ferreira. III. Título.

CDD: 515.5

Bibliotecária: Vanusa Maciel CRB- 9/1928

TERMO DE APROVAÇÃO

Os membros da Banca Examinadora designada pelo Colegiado do Programa de Pós-Graduação em ENGENHARIA AMBIENTAL da Universidade Federal do Paraná foram convocados para realizar a arguição da Dissertação de Mestrado de **DENNER RIBEIRO MACHADO** intitulada: **Aproximações do problema de Graetz estendido para quantificar a dispersão e deposição de material particulado em tubos**, sob orientação do Prof. Dr. EMILIO GRACILIANO FERREIRA MERCURI, que após terem inquirido o aluno e realizada a avaliação do trabalho, são de parecer pela sua APROVAÇÃO no rito de defesa.

A outorga do título de mestre está sujeita à homologação pelo colegiado, ao atendimento de todas as indicações e correções solicitadas pela banca e ao pleno atendimento das demandas regimentais do Programa de Pós-Graduação.

Curitiba, 14 de Abril de 2021.

Assinatura Eletrônica

19/04/2021 15:52:05.0

EMILIO GRACILIANO FERREIRA MERCURI

Presidente da Banca Examinadora (UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARANÁ)

Assinatura Eletrônica

20/04/2021 07:16:10.0

NELSON LUÍS DA COSTA DIAS

Avaliador Interno (UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARANÁ)

Assinatura Eletrônica

20/04/2021 11:06:09.0

ANTÔNIA SÔNIA ALVES CARDOSO DINIZ

Avaliador Externo (PONTIFÍCIA UNIVERSIDADE CATÓLICA DE MINAS GERAIS)

*Dedico esta dissertação a minha
maior fonte de motivação, força e
perseverança, minha mãe Maria da
Piedade de Sá Machado.
(In memoriam)*

AGRADECIMENTOS

Agradeço ao meu orientador, Emílio Graciliano Ferreira Mercuri, por todo apoio dedicado para idealização e desenvolvimento deste trabalho. Serei eternamente grato pelas orientações, por me despertar o entusiasmo profundo pela ciência, pela pesquisa e suas fundamentações. Sobretudo por sua dedicação, atenção e paciência ao longo de todo este percurso, mesmo nos momentos mais difíceis.

Aos pesquisadores e professores Antônio Sônia Alves Cardoso Diniz, Nelson Luís Dias e Marcelo Risso Errera que aceitaram o convite de compor a minha banca seja ela de qualificação ou defesa, dedicando tempo e atenção, além de também enviarem suas contribuições para este trabalho, vocês também são fontes inspiradoras para publicação desta dissertação.

À CAPES, pela concessão da bolsa de estudo, que permitiu com que esta pesquisa fosse realizada, contribuindo para meu crescimento pessoal e profissional.

Externo aqui também, o meu sincero muito obrigado, a todos os professores e todas as professoras que contribuíram direta ou indiretamente para esta pesquisa. Em especial a todos professores do Programa de Pós-Graduação em Engenharia Ambiental (PPGEA), que compartilharam comigo conhecimentos fundamentais para este trabalho e para minha vida acadêmica e profissional. Um agradecimento especial também ao funcionário Leonildo Alves Leal, secretário do PPGEA que sempre me ajudou e esteve disponível quando precisei.

Agradeço também a todos colegas do PPGEA e do Laboratório de Computação e Tecnologia em Engenharia Ambiental (LACTEA) que contribuíram para o meu trabalho de alguma forma e que se fizeram presentes nesta jornada, que me acompanharam durante disciplinas, seminários, congressos, cafés e almoços no RU. Não foi um período fácil, mas de muito crescimento profissional e pessoal, e sou grato por tê-los por perto. Em especial, a Nicole Laureanti, Rodrigo Rodakoviski e Leatrice Rodrigues por me acompanharem e apoiarem ao longo desse incrível processo de aprendizado. Tudo foi mais leve na companhia de vocês. Obrigado amigos e mestres!

Agradeço aos meus familiares e amigos, que mesmo perto ou distantes, se fizeram presentes de uma forma ou de outra e tornaram essa jornada uma experiência única. O espaço é curto para nomear todos que estiveram comigo, mas quero que vocês Lucimara, Stella, Isabelle, Gleici, Paula, Danielle, Gabriela, Tamires e todos os demais, saibam que a colaboração de todos foi fundamental para chegar até aqui. Obviamente esse agradecimento inclui meu cãozinho, Mac, que me aguentou nos dias bons e ruins e que durante as atividades de *home office* ficou ali do meu lado me dando força e muito carinho.

Em especial, agradeço a minha mãe Maria da Piedade de Sá Machado (*In memoriam*) pela dedicação, amor e carinho em todos os anos da minha vida, por sempre ter incentivado a minha educação e meu desenvolvimento, mesmo não tendo concluído nem a quarta série do fundamental. Mesmo com poucos recursos, sua motivação e empenho para me tornar um ser humano melhor a cada dia, me fizeram chegar até aqui. Essa é mais uma vitória nossa!

“A ciência é diferente de muitos outros empreendimentos humanos – evidentemente não pelo fato de seus profissionais sofrerem influência da cultura em que se criaram, nem pelo fato de ora estarem certos, ora errados (o que é comum a toda atividade humana), mas pela sua paixão de formular hipóteses testáveis, pela sua busca de experimentos definitivos que confirmem ou neguem as ideias, pelo vigor de seu debate substantivo e pela sua disposição a abandonar as ideias que forem consideradas deficientes. Porém, se não tivéssemos consciência de nossas limitações, se não procurássemos outros dados, se nos recusássemos a executar experimentos controlados, se não respeitássemos a evidência, teríamos muito pouca força em nossa busca da verdade. Por oportunismo e timidez, poderíamos ser então fustigados por qualquer brisa ideológica, sem nenhum elemento de valor duradouro a que nos agarrar.”

Carl Sagan, *O Mundo Assombrado pelos Demônios*

RESUMO

Neste estudo a dispersão e deposição de partículas é analisada em um tubo circular simétrico com fluxo laminar plenamente desenvolvido. A adoção dessa abordagem possibilitou uma análise da deposição das partículas de forma analítica, baseada no problema de Graetz estendido, e além disso permitiu analisar a eficiência de amostragem isocinética. É também proposto uma abordagem alternativa, usando uma solução numérica, aplicando-se o esquema de diferenças finitas denominado Crank-Nicolson em conjunto com o método TDMA. Na abordagem analítica emprega-se três rotas distintas, uma com a aplicação direta do método de Frobenius, e outras duas usando a teoria das funções hipergeométricas. A modelagem físico-matemática deu origem a um problema de Sturm-Liouville (que tem autovalores e autofunções associados) e cada solução analítica apresenta-se composta por uma série infinita diferente. Em cada série foi comparado o uso de diferentes quantidades de autovalores, sendo que o número de autovalores utilizados foram 6, 50 e 75. A discussão dos resultados aponta o aparecimento de um fenômeno análogo ao fenômeno de Gibbs nas regiões onde há a sobreposição das condições de fronteira, quando aplicado principalmente o método de Frobenius diretamente. Sobre o olhar da deposição, com maior atenção para as partículas de MP_{10} e $MP_{2,5}$, tem-se que os limites de máximo e mínimo de deposição foram de respectivamente 98,14% e 0,09% para $MP_{2,5}$ considerando o uso de 75 autovalores para o intervalo de velocidade definido na análise. De forma similar, para MP_{10} a deposição foi de respectivamente 66,72% e 0,08% para os limites de máximo e mínimo de deposição. Além disso, a diferença na taxa de deposição foi mais significativa em velocidades mais elevadas ao se comparar diferentes números de autovalores, tendo seu máximo atingido em $\bar{U} = 1,00$ [m/s] o que ajudou a reduzir a superestimação prevista de deposição em 2,02% e 2,03%, para o $MP_{2,5}$ e MP_{10} respectivamente, em relação ao uso de 6 autovalores e em 0,05% em relação ao uso de 50 autovalores para o $MP_{2,5}$ e MP_{10} . Já sobre a ótica da amostragem isocinética, a diferença significativa foi observada pelo emprego de séries diferentes, não tendo sido observadas diferenças gráficas entre o emprego de quantidades distintas de autovalores. Por fim, no resultado numérico, foi verificado que o esquema se torna estável apenas para algumas condições específicas da malha: o tamanho do passo na direção radial precisa ser 10^{-4} vezes menor do que o tamanho do passo na direção axial, para reduzir a diferença entre a solução analítica e numérica. Em suma, os resultados mostram que a abordagem aqui adotada além de ter uma consonância com a física do problema proposto, possui potencial para contribuir em comparações com análises de campo em condições semelhantes, além de potencializar a investigação do problema em outras configurações.

Palavras-chave: Problema de Graetz estendido. Taxa de deposição de material particulado. Método de Frobenius. Funções Hipergeométricas. Amostragem Isocinética.

ABSTRACT

In this study, the dispersion and deposition of particles are analyzed in a symmetrical circular tube with a fully developed laminar flow. The approach of this approach made it possible to analyze the particle deposition analytically, based on the extended Graetz problem, and to analyze the efficiency of isokinetic sampling. An alternative approach is also proposed, using a numerical solution, applying the finite difference scheme called Crank-Nicolson in conjunction with the TDMA method. In the analytical approach, three distinct routes are used, one with the direct application of the Frobenius method, and the other two using the theory of hypergeometric functions. Physical-mathematical modeling gave rise to a Sturm-Liouville problem (which has eigenvalues and eigenfunctions associated) and each analytical solution is composed of a different infinite series. In each series, the use of different amounts of eigenvalues was compared, with the number of eigenvalues used being 6, 50 and 75. The discussion of the results indicated the appearance of a phenomenon analogous to the Gibbs phenomenon in the regions where there is an overlap of the boundary conditions when applied mainly to the Frobenius method directly. Regarding the deposition look, with greater attention to the particles of PM_{10} and $PM_{2.5}$, the maximum and minimum deposition limits were respectively 98.14% and 0.09 % for $PM_{2.5}$ considering the use of 75 eigenvalues for the speed range defined in the analysis. Likewise, for pm_{10} the deposition was 66.72 % and 0.08 % respectively for the maximum and minimum deposition limits. Furthermore, the difference in the deposition rate was more significant at higher speeds when comparing different numbers of eigenvalues, with its maximum reaching $\bar{U} = 1.00$ [m / s], which helped to reduce overestimation estimated deposition of 2.02 % and 2.03 %, for $PM_{2.5}$ and PM_{10} respectively, concerning the use of 6 eigenvalues and 0.05 % reduction concerning the use of 50 eigenvalues for $PM_{2.5}$ and PM_{10} . Regarding the perspective of isokinetic sampling, the difference found was observed by using different series, no graphic differences were observed between the use of different amounts of eigenvalues. Finally, in the numerical result, it was verified that the scheme becomes stable only for some defined conditions of the mesh: the step size in the radial direction needs to be 10^{-4} times smaller than the step size in the direction axial, to reduce the difference between the analytical and numerical solution. In short, the results presented that the approach adopted here, in addition to being in line with the physics of the proposed problem, have the potential to contribute to comparisons with field analyzes under similar conditions, in addition to enhancing the investigation of the problem in other configurations.

Keywords: Graetz problem extended. Deposition rate of particulate matter. Frobenius method. Hypergeometric functions. Isokinetic sampling.

LISTA DE FIGURAS

2.1	Distribuição de tamanho de aerossol atmosférico idealizada.	20
2.2	Esquema de condição de amostragem isocinética e anisocinética.	22
3.1	Fluxograma síntese da metodologia adotada	29
4.1	Geometria do tubo em coordenadas cilíndricas.	31
4.2	Condições de contorno do Problema de Graetz Estendido	32
5.1	Discretização do tubo e o esquema de Crank Nicolson.	39
6.1	Autofunções obtidas pelo laço iterativo aplicando a condição de contorno na parede.. . . .	46
6.2	Regressão linear para os 75 λ_n (Tabela 6.2)	47
6.3	Constantes para cada autovalor	48
6.4	Perfis de concentração $\tilde{Z} \geq 0,005$ e 6, 50 e 75 autovalores - Para \tilde{C} , \tilde{C}^* ou $\tilde{C}^\#$. .	49
6.5	Diferenças dos perfis de concentração para $\tilde{Z} \geq 0,005$ e com uso de 6 autovalores - Comparativo entre (\tilde{C}^* ou $\tilde{C}^\#$) com \tilde{C}	49
6.6	Diferenças dos perfis de concentração para $\tilde{Z} \geq 0,005$ e com uso de 50 e 75 autovalores - Comparativo entre \tilde{C}^* e $\tilde{C}^\#$	50
6.7	Diferenças dos perfis de concentração para $\tilde{Z} \leq 0,005$ e com uso de 6 autovalores - Para \tilde{C} , \tilde{C}^* ou $\tilde{C}^\#$	50
6.8	Diferenças dos perfis de concentração para $\tilde{Z} \leq 0,005$ e com uso 6 autovalores - Comparativo entre (\tilde{C}^* ou $\tilde{C}^\#$) com \tilde{C}	50
6.9	Diferenças dos perfis de concentração para $\tilde{Z} \leq 0,005$ e com uso de 50 ou 75 autovalores - Comparativo entre \tilde{C}^* e $\tilde{C}^\#$	51
6.10	Perfis de concentração $\tilde{Z} \leq 0,005$ e 50 autovalores.	51
6.11	Perfis de concentração $\tilde{Z} \leq 0,005$ e 75 autovalores.	51
6.12	Diferenças dos perfis de concentração para $\tilde{Z} \geq 0,005$ comparando 75 ou 50 com 6 autovalores	53
6.13	Diferenças dos perfis de concentração para $\tilde{Z} \leq 0,005$ comparando 75 ou 50 com 6 autovalores	53
6.14	Diferenças dos perfis de concentração para $\tilde{Z} \leq 0,005$ comparando 75 com 50 autovalores	53
6.15	Concentração média e deposição para diferentes D_p variando \bar{U}	54
6.16	Concentração média e deposição para diferentes \bar{U} variando D_p	55
6.17	Diferenças na deposição para diferentes \bar{U} e D_p	56

6.18	Comportamento dos números adimensionais em relação deposição para diferentes \bar{U} variando D_p	57
6.19	Comportamento dos números adimensionais em relação deposição para diferentes D_p variando \bar{U}	57
6.20	Perfil 2D e 1D para o Caso 01 de MP_{10}	58
6.21	Perfil 2D e 1D para o Caso 02 de MP_{10}	59
6.22	Perfil 2D e 1D para o Caso 03 de MP_{10}	59
6.23	Perfil 2D e 1D para o Caso 04 de MP_{10}	60
6.24	Perfil 2D e 1D para o Caso 05 de MP_{10}	60
6.25	Perfil 2D e 1D para o Caso 01 de $MP_{2,5}$	61
6.26	Perfil 2D e 1D para o Caso 02 de $MP_{2,5}$	61
6.27	Perfil 2D e 1D para o Caso 03 de $MP_{2,5}$	62
6.28	Perfil 2D e 1D para o Caso 04 de $MP_{2,5}$	62
6.29	Perfil 2D e 1D para o Caso 05 de $MP_{2,5}$	63
6.30	Geometria do tubo com sonda isocinética	63
6.31	Eficiência de amostragem para as 3 soluções.	64
6.32	Eficiência de amostragem com 75 autovalores - Comparando Whittaker e a Nova proposição.	64
6.33	Comparação solução Numérica e Analítica - Caso 01	66
6.34	Comparação solução Numérica e Analítica - Caso 02	67
6.35	Comparação solução Numérica e Analítica - Caso 03	68
6.36	Comparação solução Numérica e Analítica - Caso 04	69
6.37	Comparação solução Numérica e Analítica - Caso 05	70
6.38	Perfil numérico ao longo de \tilde{Y} para fonte pontual em diferentes posições radiais .	71
6.39	Perfil numérico ao longo de \tilde{Z} para fonte pontual em diferentes posições radiais .	72

LISTA DE TABELAS

2.1	Coeficientes de difusão calculado para diferentes diâmetros de partículas.	28
4.1	Soluções da equação 4.23 para diferentes valores dos parâmetros determinantes .	37
6.1	Autovalores (λ_n) e constantes (A_n) do Problema de Graetz estendido obtidos aplicando as funções hipergeométricas (Gz_n^* e $Gz_n^\#$)	45
6.2	Autovalores (λ_n) e constantes (A_n) do Problema de Graetz estendido obtidos aplicando o método de Frobenius (Gz_n) e os primeiros das funções hipergeométricas (Gz_n^* e $Gz_n^\#$)	46
6.3	MAE e RMSE dos perfis de concentração $\tilde{Z} \geq 0,005$	52
6.4	MAE e RMSE dos perfis de concentração $\tilde{Z} \leq 0,005$	52
6.5	Casos de 01 a 05 para MP_{10}	58
6.6	Casos de 01 a 05 para $MP_{2,5}$	58
6.7	MAE e RMSE - Solução Analítica \times Numérica	65

LISTA DE ACRÔNIMOS

CONAMA	Conselho Nacional do Meio Ambiente
MAE	<i>Mean Absolute Error</i> (Erro Médio Absoluto)
MDF	Método de Diferenças Finitas
MP	Material Particulado
OMS	Organização Mundial da Saúde
RMSE	<i>Root Mean Square Error</i> (Erro quadrático médio)
TDMA	<i>Tridiagonal Matrix Algorithm</i> (Algoritmo da Matriz Tridiagonal)

LISTA DE SÍMBOLOS

Os principais símbolos e notações utilizados ao longo do texto estão listados a seguir. O leitor deve se atentar ao fato de que, às vezes, o mesmo símbolo foi utilizado para representar diferentes quantidades. Nestes casos uma nota de rodapé foi incluída junto a citação da notação com sua devida definição, ou uma observação nesta lista de símbolos. Salienta-se que o apêndice pode repetir símbolos aqui empregados, mas estes estão devidamente referenciados na sua seção específica.

Alfabeto Romano

a, b, c	Parâmetros reais ou complexos arbitrários da função hipergeométrica
A	Área da seção transversal
A_n	Coefficientes da solução geral
$A(x), B(x), C(x), M(x), N(x)$	Funções analíticas arbitrárias
$a_0, a_1, a_2, b_0, b_1, b_2$	Coefficientes da equação 4.23
A_i, B_i, C_i e D_i	Coefficientes do método numérico
$A_0, A_1, A_2, B_0, B_1, B_2$	Coefficientes da equação 4.24
C	Concentração de partículas
C_p	Concentração na parede
C_0	Concentração na entrada
c'_i, d'_i	Variáveis do TDMA
D	Difusividade de massa
d_g	Diâmetro da molécula de gás
D_h	Diâmetro hidráulico do tubo
D_p	Diâmetro das partículas
$Gz(\tilde{Y}, \lambda_n)$	Série de Graetz (Usando Frobenius)
$Gz^*(\tilde{Y}, \lambda_n)$	Série de Graetz (Usando Whittaker)
$Gz^\#(\tilde{Y}, \lambda_n)$	Série de Graetz (Usando a Nova proposição)
h	Incremento na direção radial no método numérico
H	Nó de fronteira (superior) na direção radial (Capítulo 5)
i, j	Índices variáveis
k	Constante de Boltzmann;
	Incremento na direção axial no método numérico (Capítulo 5)
K	Nó de fronteira (superior) na direção axial (Capítulo 5)

L	Comprimento do tubo; Escala de comprimento representativa na equação 2.9
M	Peso molecular
N_a	Constante de Avogadro
$P(x), Q(x), S(x)$	Coefficientes do sistema de Sturm-Liouville
p	Pressão
R	Raio
R_c	Raio de convergência
R^*	Constante universal dos gases
(r, θ, z)	Coordenadas cilíndricas $\in \mathbb{R}^3$
r_1	Raio do amostrador isocinético
T	Temperatura
t	Tempo
(u, v, w)	Componentes da velocidade em coordenadas cartesianas $\in \mathbb{R}^3$; Componentes da velocidade em coordenadas cilíndricas $\in \mathbb{R}^3$
v	Mudança de variável (seção 4.1.4)
(x, y, z)	Coordenadas cartesianas $\in \mathbb{R}^3$
x_0	Ponto arbitrário
x_i, x_n	Variáveis de substituição reversa do TDMA
$y(x)$	Função arbitrária

Alfabeto Grego

η	Eficiência de amostragem
μ	Viscosidade dinâmica do ar
ν	Viscosidade cinemática
ρ	Densidade (massa específica)
ζ, β	Funções para separação de variáveis $\zeta(\tilde{Z})\beta(\tilde{Y})$
$\Gamma, \xi, \gamma, \delta$	Números reais que constituem um sistema de Sturm-Liouville
σ_n	Autovalores do sistema Sturm-Liouville
ϕ_n	Autofunções do sistema Sturm-Liouville
λ	Constante de separação independente
λ_n	Constante de separação n-éssima
λ_g	Caminho livre médio
κ e ς	Parâmetros da equação de Whittaker
χ e ψ	Mudança de variáveis - Whittaker
φ e ϱ	Mudança de variáveis - Nova proposição

Vetores e Matrizes

A	Matriz Arbitrária
a_n, b_n, c_n	Vetores da matriz do TDMA
J	Matriz Jacobiana
U	Velocidade do fluido
\overline{U}	Velocidade média do fluido
\overline{U}_{iso}	Velocidade média isocinética

Caracteres e Notações Especiais

$\langle f, g \rangle$	Produto interno arbitrário no sistema de Sturm-Liouville
$(a)_n$	Notação de Pochhammer
$\mathcal{D}_X, \mathcal{D}_Y, \mathcal{D}_Z$	Coefficientes de difusão em coordenadas cartesianas $\in \mathbb{R}^3$
\mathcal{D}	Coefficiente de difusão quando $\mathcal{D}_X = \mathcal{D}_Y = \mathcal{D}_Z$
\mathcal{W}	Função arbitrária usando Whittaker
\mathcal{G}	Função arbitrária usando a Nova proposição
$M(a, c, x)$	Função hipergeométrica do Primeiro tipo
$U(1 + a - c, 2 - c, x)$	Função hipergeométrica do Segundo tipo

Parâmetros Adimensionais

\tilde{C}	Concentração adimensional (Usando Frobenius)
\tilde{C}^*	Concentração adimensional (Usando Whittaker)
$\tilde{C}^\#$	Concentração adimensional (Usando a Nova proposição)
C_c	Fator de correção de Cunningham
\tilde{Y}	Variável adimensional para a direção radial
\tilde{Z}	Variável adimensional para a direção axial
Kn	Número de Knudsen
Gz	Número de Graetz
Re	Número de Reynolds
Sc	Número de Schmidt
Pe	Número de Péclet

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	17
2	REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	20
2.1	A CONDIÇÃO DE AMOSTRAGEM ISOCINÉTICA.	21
2.2	PROBLEMA DE GRAETZ E ESTUDOS DE DEPOSIÇÃO DE PARTÍCULAS.	23
2.3	NÚMEROS ADIMENSIONAIS ADOTADOS	25
2.4	COEFICIENTE DE DIFUSÃO.	26
3	METODOLOGIA DE ANÁLISE	29
4	MODELAGEM MATEMÁTICA.	30
4.1	O PROBLEMA DE GRAETZ ESTENDIDO PARA DEPOSIÇÃO DE PARTÍCULAS	30
4.1.1	Modelagem da solução analítica	31
4.1.2	Solução aplicando o método de Frobenius de forma direta.	34
4.1.3	Solução aplicando aproximações assintóticas - Função de Whittaker	34
4.1.4	Novo caminho para resolução do problema.	35
4.1.5	Cálculo do coeficiente A_n .	37
4.2	CÁLCULO DA CONCENTRAÇÃO MÉDIA	37
5	MODELAGEM NUMÉRICA.	39
5.1	DISCRETIZAÇÃO COM O ESQUEMA DE CRANK NICOLSON	39
5.2	MÉTODO DA MATRIZ TRIDIAGONAL.	41
6	RESULTADOS E DISCUSSÕES.	43
6.1	RESULTADOS DA SOLUÇÃO ANALÍTICA.	43
6.1.1	Análise dos autovalores e constantes associadas	43
6.1.2	Análises dos perfis de concentração com diferentes número de termos e diferentes soluções	48
6.1.3	Resultados da concentração e de deposição no tubo	54
6.1.4	Perfis de concentração para MP_{10} e $MP_{2,5}$	57
6.1.5	Discussões sobre a isocinética	63
6.2	RESULTADOS SOLUÇÃO NUMÉRICA	65
6.2.1	Solução numérica com condição de entrada diferente da solução analítica	65
7	CONSIDERAÇÕES FINAIS	73
	REFERÊNCIAS	76
	APÊNDICE A – MÉTODOS MATEMÁTICOS EMPREGADOS.	81
A.1	O MÉTODO DE FROBENIUS.	81
A.2	FUNÇÕES HIPERGEOMÉTRICAS CONFLUENTES	82

A.3	PROBLEMA DE STURM-LIOUVILLE	84
	APÊNDICE B – DETALHAMENTO DOS MÉTODOS PARA OBTEN- ÇÃO DA SOLUÇÃO ANALÍTICA.	85
B.1	MUDANÇA DE COORDENADAS	85
B.2	MÉTODO DE SEPARAÇÃO DE VARIÁVEIS APLICADO A SOLUÇÃO DO PROBLEMA	87
B.3	MÉTODO DE FROBENIUS APLICADO A SOLUÇÃO DO PROBLEMA . . .	87
B.4	MUDANÇA DE VARIÁVEL PARA FUNÇÃO DE WHITTAKER	90
B.5	CÁLCULO DO COEFICIENTE A_N	91
	APÊNDICE C – CÓDIGOS COMPUTACIONAIS	93
C.1	CÓDIGOS DA SOLUÇÃO ANALÍTICA	93
C.1.1	Verificando valores de Lambdas	93
C.1.2	Cálculo do coeficiente A_n	94
C.1.3	Cálculo da concentração	95
C.2	CÓDIGO DA SOLUÇÃO NUMÉRICA - GERAL.	95

1 INTRODUÇÃO

O transporte de um escalar em um escoamento pode ocorrer pelos mecanismos físicos de advecção e difusão (Bird, 2002; Fernandes, 2003; Seinfeld e Pandis, 2016). Na atmosfera, por exemplo, a dispersão de poluentes, como comentam Stull et al. (2018), é influenciada por fluxos de calor e quantidade de movimento. Partículas em suspensão são transportadas em um fluido devido a gradientes de concentração, temperatura, pressão ou velocidade.

Uma das aplicações do estudo do movimento de partículas é a análise relacionada à deposição destas em superfícies. Após sua emissão na atmosfera, a deposição de material particulado (MP), por exemplo, pode acarretar danos ao meio ambiente, à saúde pública e ao funcionamento de equipamentos.

Nesse contexto, este trabalho busca entender e interpretar como se comporta o fenômeno da deposição de MP utilizando um caso particular, de modo mais simplificado do que a avaliação de tal deposição em campo. Na abordagem aqui adotada, a deposição do MP é analisada em um tubo circular simétrico com fluxo laminar plenamente desenvolvido, utilizando aproximações para a solução do problema nos formatos analítico e numérico.

A formulação matemática para a deposição de partículas sobre a parede do tubo é tratada a partir de uma adaptação do problema de Graetz, creditado ao físico alemão Leo Graetz. Graetz (1882) em sua publicação disserta sobre a condutividade térmica e analisa a troca de calor num tubo com perfil de velocidade conhecido. A teoria de transferência de calor entre um fluido e a parede de um tubo pode ser generalizada para diversas aplicações. Soluções desse problema têm sido frequentemente pesquisada em diferentes abordagens, como em estudos de termoforese e como no caso aqui apresentado, para análise da deposição de MP e condições de amostragem isocinética (Ghiaasiaan, 2011).

Na amostragem do MP em escoamentos, principalmente confinados, deve-se considerar a importância das condições isocinéticas da amostragem. Esta é uma técnica de medição que visa garantir que a vazão de aspiração do equipamento de medida seja igual à dos fluxos gasosos na região de interesse do escoamento. Essa metodologia é amplamente utilizada nos gases de exaustão de processos industriais que utilizam fornos e fornalhas, processos estes em que a combustão pode dar origem a efluentes gasosos que são eliminados em chaminés, caracterizando-se como fontes pontuais emissoras de MP (Wilcox, 1956; Fuchs, 1975; Zhu, 1999).

Na abordagem aqui adotada a deposição de MP no tubo pode ser interpretada de maneira semelhante ao que ocorre em um filtro tubular, como os filtros manga. A filtração remove as partículas do fluxo e elas ficam retidas ou depositadas na parede do tubo, uma analogia ao princípio de adsorção em superfícies. Conforme Fernandes (2003), a adsorção é um fenômeno físico no qual uma substância fixa-se na superfície de outra, em geral um meio sólido, o adsorvedor (sólido com microporosos e que retém as partículas). Assim, as interações entre a parede do tubo e as partículas partem da consideração que as partículas ao encontrarem a parede são removidas do escoamento, se considerado que as paredes são formadas por materiais com capacidade adsorvente.

Para Bejan e Kraus (2003) e Basmadjian (1999) é possível abordar o problema Graetz de modo a se abranger uma variedade de condições na parede, geometrias de dutos, condução axial e fluidos não newtonianos, abordagens estas chamadas de “Problema de Graetz Estendido”, como aqui adotado. O equacionamento para estes casos também parte da mesma equação base que será apresentada no capítulo 4. Além disso, os autores afirmam que tal modelagem também

aplica-se ao transporte de massa que pode surgir em processos de membrana ou quando uma substância química se dispersa em um sistema tubular.

Na literatura o problema de Graetz é amplamente discutido e apresentados em vários estudos como os realizados por [Tan e Chia-Jung \(1970\)](#); [Michelsen e Villadsen \(1974\)](#); [Ryzhkov \(2013\)](#); [Bowen et al. \(1976\)](#); [Lin e Tsai \(2003\)](#); [Tyree e Allen \(2004\)](#); [Bennett \(2019\)](#); dentre outros. O destaque aqui analisado é a comparação e o emprego de três caminhos distintos para obtenção de soluções analíticas, bem como, com o emprego de um esquema numérico.

Para o desenvolvimento da solução numérica, aplicou-se aqui o esquema de diferenças finitas denominado Crank-Nicolson em conjunto com o método TDMA (*Tridiagonal Matrix Algorithm*). A resolução computacional é comparável às soluções analíticas, além de possibilitar o estudo de outra configuração da fonte de material particulado na entrada do tubo. A escolha deste esquema numérico possibilita também discutir a discretização de diferenças finitas apresentada por [Ali e Omar \(2015\)](#).

Este trabalho se justifica pelas lacunas existentes na literatura referentes ao estudo da acurácia das soluções analíticas do problema de Graetz estendido e pelo emprego corrigido da descrição numérica, em contraposição ao esquema numérico apresentado por [Ali e Omar \(2015\)](#). Além disso, a adoção do caminho analítico baseado nas soluções apresentadas por [Bateman \(1953\)](#); [Polyanin e Zaitsev \(2002\)](#) mostrou-se aplicável à equação aqui apresentada.

A interpretação do tubo como meio filtrante de MP e potenciais aplicações, apontam que os desdobramentos aqui apresentados, são potencialmente úteis. Principalmente se atrelados ao desenvolvimento de novas ferramentas de medição e estudos que aplicam os dados medidos de MP, ou estimativas de deposição, para sanar e/ou justificar outras questões em investigação pela ciência. Enquadra-se neste cerne, as tecnologias emergentes para monitoramento de material particulado, com um destaque ao uso de sensores óticos de medição, a microfluídica e os estudos de sujidade de sistemas fotovoltaicos ([Carminati et al., 2017](#); [Gulia et al., 2020](#); [Zheng et al., 2018](#); [Chen et al., 2019](#); [Micheli, 2017](#)).

Em suma busca-se como problemática deste estudo analisar e quantificar os fenômenos de dispersão e deposição de MP em um tubo circular simétrico com fluxo laminar plenamente desenvolvido. Parte-se da hipótese que as diferentes rotas adotadas podem possuir limitações para o problema de estudo dentro da configuração aqui analisada. Neste contexto, são comparados três caminhos para obter a solução geral analítica da equação da advecção-difusão em coordenadas cilíndricas do problema, além de uma discretização com um esquema numérico. Os perfis de concentração de MP dentro do tubo, além de terem consonância com a física do problema, podem futuramente contribuir nas análises de campo, tanto para o estudo de meios filtrantes tubulares quanto para melhoramentos nas técnicas de amostragem isocinética.

Portanto, o objetivo do presente estudo é o de analisar aproximações da dispersão e deposição de MP em um tubo baseadas no Problema de Graetz estendido nos formatos analítico e numérico. Para atender a este objetivo, busca-se: i) investigar os autovalores aplicáveis à solução geral, de modo a verificar se a equação proposta por [Sellars et al. \(1954\)](#) é aplicável às três rotas analíticas apresentadas; ii) comparar as três soluções analíticas para avaliar qual delas tem o menor erro ou é menos instável, discutindo as variações de caminhos adotados para obtenção da solução geral; iii) verificar qual o melhor refinamento da malha aplicada no método numérico com mesmas configurações do modelo analítico; iv) abordar o problema com uma configuração distinta de condição inicial com o modelo numérico para verificar a extensão da equação do problema em outra configuração de fonte e v) debater sobre o potencial da modelagem e dos resultados obtidos nas configurações analisadas e sua interpretação do tubo como meio filtrante de material particulado e potenciais aplicações.

Para a realização desses objetivos, este trabalho foi dividido em 7 capítulos incluindo esta introdução. No capítulo 2 descreve-se a revisão de literatura, onde são apresentados: o conceito de amostragem isocinética, o problema de Graetz estendido, os princípios e trabalhos relacionados à modelagem da dispersão e deposição de partículas em tubos. Em seguida o capítulo 3 descreve a metodologia proposta. Ademais, os capítulos 4 e 5 são dedicados ao detalhamento, respectivamente, das modelagens analíticas e da modelagem numérica. No penúltimo capítulo (capítulo 6) apresentam-se os resultados e discussões, de modo a englobar os resultados analíticos, numéricos e suas relações. E por fim discute-se no capítulo 7 as considerações finais obtidas e os potenciais desdobramentos deste estudo.

Além disso, a fim de complementar o texto, o apêndice A apresenta uma descrição sucinta do Método de Frobenius, das Funções hipergeométricas confluentes e do Problema de Sturm-Liouville. Já o apêndice B apresenta um detalhamento dos métodos aplicados diretamente na solução do problema como, por exemplo, as mudanças de variáveis empregadas e o cálculo do coeficiente A_n (que compõe a solução geral). E por último, no apêndice C é possível verificar os principais códigos computacionais aplicados na solução analítica e numérica.

2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

O MP é um sistema de partículas sólidas ou líquidas que podem estar suspensas por uma mistura de gases (Seinfeld e Pandis, 2016; McMurry, 2015). Além disso, o MP ou aerossol, é um poluente atmosférico e há a necessidade de ações para mitigação e ou controle das emissões, pois há implicações à saúde dos seres humanos e do ecossistema. Nesse sentido é importante realizar estimativas matemáticas para dispersão, deposição e amostragem de partículas.

No que tange ao MP na baixa atmosfera duas frações são destacadas. O MP_{10} que “são partículas de material sólido ou líquido suspensas no ar, na forma de poeira, pólen, entre outros e com diâmetro aerodinâmico equivalente de corte de 10 micrômetros” (CONAMA, 2018, Art. 3º - VII). E o $MP_{2,5}$ que “são partículas de material sólido ou líquido suspensas no ar, na forma de poeira, partículas de combustão, compostos orgânicos, entre outros e com diâmetro aerodinâmico equivalente de corte de 2,5 micrômetros” (CONAMA, 2018, Art. 3º - VIII).

Dentre as várias fontes de MP as principais são: queima de combustíveis fósseis, combustão de biomassa vegetal, emissões de amônia na agricultura e emissões decorrentes de obras e pavimentação vias, ou emissões industriais (BRASIL, 2019). Sendo as frações de partículas MP_{10} , $MP_{2,5}$ e ultrafinas, que são tipicamente medidos na atmosfera para fins de estudos dos efeitos do MP na saúde (OMS, 2006; Kalberer, 2015).

As partículas atmosféricas geralmente cobrem uma faixa de tamanho de várias ordens de magnitude, de cerca de 0,01 a 100 μm (Kalberer, 2015). Geralmente, divide-se tais tamanhos em quatro grupos. São eles: partículas de modo fino, consistindo-se no modo de nucleação (diâmetro < 0,01 μm) e modo de Aitken (< 0,1 μm), modo de acumulação de partículas (0,1 – 2 μm), e partículas de modo grosso (maiores que 2 μm), que inclui gotículas de nuvem (Kalberer, 2015; McMurry, 2015). Tais distribuições idealizadas podem ser visualizadas na Figura 2.1.

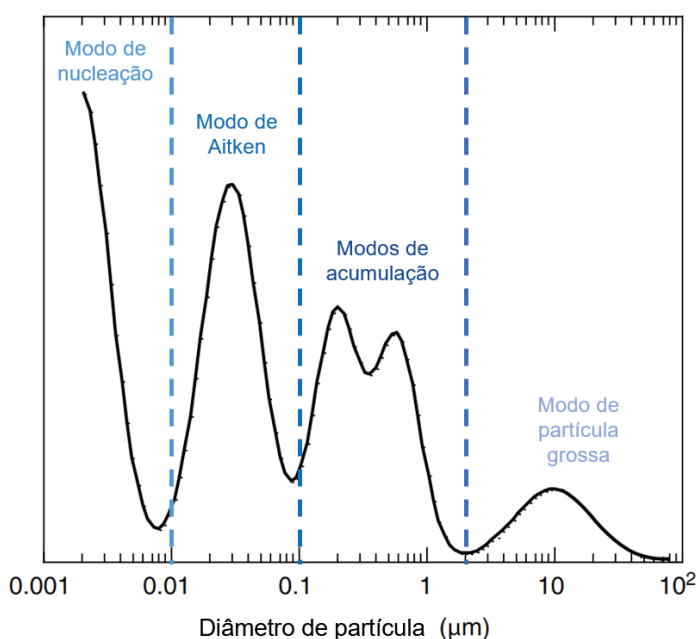


Figura 2.1: Distribuição de tamanho de aerossol atmosférico idealizada.

Fonte: Adaptado de McMurry (2015)

Nas fontes de efluentes gasosos, onde geralmente são instalados dutos e chaminés, o MP é amostrado com o objetivo de mensurar o efluente no ponto de origem, ou emissão. Nesse processo, é inerente destacar a necessidade de uma medição adequada do fluxo de gás, considerando não apenas a concentração de partículas, mas também a vazão dos gases do sistema coloidal. Em muitas medições realizadas em tubulações, a velocidade do escoamento é mensurada com o auxílio de um tubo de Pitot. Medidas da velocidade também podem ser realizadas com anemômetros e até mesmo partir de observações visuais (Vallero, 2008).

Quando uma partícula encontra a parede de uma tubulação ela pode ficar retida devido à rugosidade da parede ou pode sofrer adsorção. Conforme Fernandes (2003); Tan (2014) a adsorção é um fenômeno no qual uma substância fixa-se na superfície de outra, em geral um meio sólido, ou seja, as partículas são atraídas para as superfícies e, conseqüentemente, separadas da corrente de gás principal. A retenção das moléculas ocorre, segundo os autores, através de forças de coesão, como as forças de Van der Waals, entre o adsorvente e o material retido.

A adsorção pode ser aplicada em técnicas de controle da poluição atmosférica que se baseiam na transferência de massa. O processo de adsorção pode ser descrito em três etapas: num primeiro momento pelo espalhamento do material a ser adsorvido na superfície, seguida de penetração nos micróporos do material adsorvente e por último a fixação nessa superfície. Os principais adsorventes conhecidos são: carvão ativado, alumina ativada, polímeros sintéticos, sílica gel e peneiras moleculares (Fernandes, 2003; Tan, 2014).

Associando a adsorção ao MP, pode-se citar os estudos realizados por Ysebaert et al. (2021); Xie et al. (2021); Wang et al. (2018). As análises realizadas pelos autores, sobre o olhar diferentes mecanismos de deposição a seco de MP, abordam desde o emprego de nanomateriais na superfície até a aplicabilidade potencial de paredes verdes (atribuída à macro e microestrutura das folhas da planta) como adsorvedores.

Ademais, de acordo com McMurry (2015); Seinfeld e Pandis (2016) a difusão é mais significativa em partículas menores, em geral, menores que 0,5 μm . Para partículas maiores, a remoção por impactação na parede guiada por forçante advectivo se torna mais significativa. Espera-se portanto que a filtração em dispositivos tubulares seja mais eficaz para pequenas partículas. Ou seja, justifica-se estudar a influência do diâmetro das partículas D_P na dispersão das mesmas em tubos.

2.1 A CONDIÇÃO DE AMOSTRAGEM ISOCINÉTICA

A amostragem isocinética é amplamente utilizada para medição de partículas em fontes emissoras estacionárias de MP. Este princípio consiste, em linhas gerais, em retirar uma amostra do fluxo de gás na mesma taxa que está se movendo através do duto ou chaminé. Tais sistemas permitem o monitoramento de uma ampla variedade de poluentes, dentre eles o MP, e possibilita o seu enquadramento aos padrões de emissão legais estabelecidos em normas ambientais.

Segundo Zhu (1999) “o fluxo de massa de partículas é normalmente determinado usando o método de amostragem isocinética”. Nesse sentido, Zhu (1999) e Wilcox (1956) comentam que uma vez determinada a velocidade da partícula, o princípio de isocinética permite medir as concentrações das partículas transportadas pelo fluxo de forma direta. Considera-se portanto, que para partículas pequenas, a velocidade da partícula pode ser aproximada como a velocidade do fluido em movimento.

Seguindo-se essa premissa, a amostragem isocinética é empregada para medições diretas de fluxos de massa particulada em fluxos de suspensão gás-sólido. Isso é realizado inserindo-se um tubo de parede fina no fluxo com suspensão de partículas para extrair amostras na condição isocinética e passando as partículas coletadas para um equipamento de amostragem.

Um instrumento comumente empregado nesse processo é a sonda de Pitot (Zhu et al., 2018; Seinfeld e Pandis, 2016; Tan, 2014).

Para Wilcox (1956), geralmente as amostras devem ser tomadas em vários pontos na direção axial do tubo. Isso garante a representatividade da coleta e minimiza efeitos de segregação do material ao longo do tubo devido ao fenômeno de dispersão. Além disso, tem-se que melhores pontos de amostragem em um sistema estão em uma linha reta ao longo do sentido do escoamento dentro da tubulação. O autor também afirma que a diferença de velocidades da sucção do amostrador e do fluido sendo amostrado podem gerar erros de medição (Wilcox, 1956).

Fuchs (1975) também comenta que o eixo da sonda de amostragem deve ser paralela às linhas de fluxo no duto (condição de isoaxialidade) para se evitar uma submedição da concentração do aerossol na amostra. Além disso, a não uniformidade de distribuição dos aerossóis em muitos casos requer com a amostragem seja executada em mais de um ponto da seção transversal. Para o autor, em tubos com simetria é possível efetuar a amostragem apenas ao longo do raio, assumindo a condição que a concentração também é simétrica em relação ao eixo, em outros casos é necessário cobrir todo o corte transversal.

Apesar de ser um princípio de simples interpretação, a implementação prática da amostragem isocinética não é considerada trivial e sua aplicação pode apresentar dificuldades (Zhu, 1999; Wilcox, 1956). Por exemplo: existem erros em determinar a velocidade do fluxo na presença de quantidade significativa de partículas; o efeito “intrusivo” da sonda de amostragem é um obstáculo para determinação da velocidade; existe perda de partículas para a deposição na parede da sonda de amostragem; existe influência das cargas eletrostáticas de partículas no movimento das mesmas; movimentos transitórios instáveis da sonda de amostragem interferem no alinhamento do fluxo e no posicionamento ou orientação da sonda.

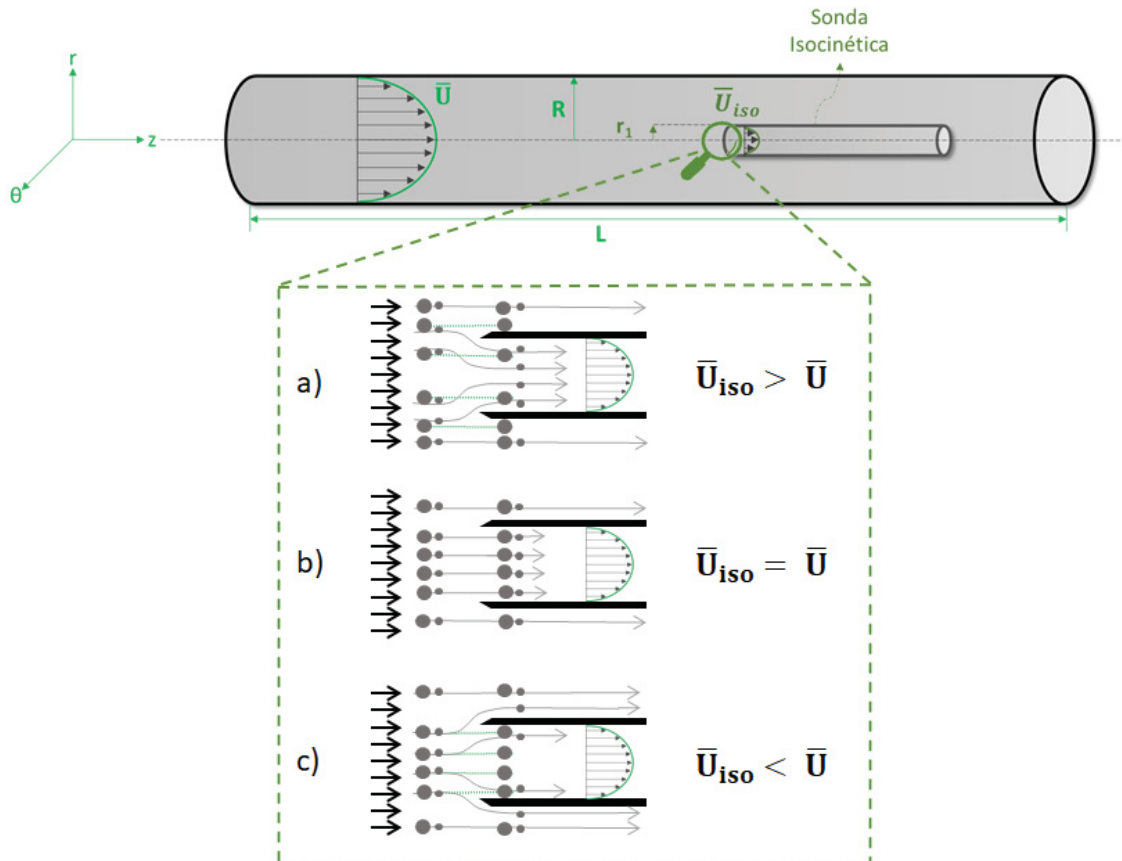


Figura 2.2: Esquema de condição de amostragem isocinética e anisocinética.

Considere a Figura 2.2, onde \bar{U} é a velocidade média do fluxo gasoso e \bar{U}_{iso} representa a velocidade média do escoamento dentro da sonda. A ilustração mostra o que ocorre com a amostragem do MP dentro dos tubos se aplicados os princípios da amostragem isocinética (b) ou anisocinética (a, c). Em (a) $\bar{U}_{iso} > \bar{U}$ e as linhas de fluxo desviam-se em direção ao amostrador, fazendo com que as partículas maiores (devido a sua inércia) não acompanhem esse desvio e sejam menos amostradas, já as partículas menores acompanham o desvio (dada a baixa inércia) e são mais amostradas. O peso menor das partículas menores faz com que a concentração de MP seja subestimada. Em (c) tem-se $\bar{U}_{iso} < \bar{U}$, e é como se o amostrador estivesse parcialmente tampado: pequenas partículas tendem a seguir o fluxo do gás (dada a baixa inércia) e as maiores serão mais amostradas. Dado o peso maior dessas partículas, consequentemente a concentração de MP é superestimada. Por fim em (b) tem-se a amostragem isocinética, no qual as velocidades médias são iguais ($\bar{U}_{iso} = \bar{U}$) e a medição da concentração é dita ideal.

Em geral, de acordo com Tan (2014), a amostragem isocinética resulta na subestimação do MP, dado que a concentração das partículas grandes contribui muito mais para a massa amostrada do que as menores. Nesse contexto, o conceito de eficiência da amostragem se faz presente. A eficiência de amostragem η é razão entre a concentração amostrada C e aquela presente no fluxo de ar, C_0 (entrada), ou seja:

$$\eta = \frac{C}{C_0} \quad (2.1)$$

Para Seinfeld e Pandis (2016), um termo que as vezes é usado para expressar eficiência de coleta é a penetração. A penetração P é baseada na quantidade não capturada pelo amostrador, ou seja: $P = 1 - \eta$.

No processo de amostragem, a garantia da condição isocinética deve ser fator de ajuste e controle dos equipamentos até que a premissa da velocidade constante seja atingida. Wilcox (1956) aponta, por exemplo, que tubos horizontais longos tendem a produzir uma deposição maior e mais concentrada perto do fundo do tubo.

Na prática, a isocinética é apontada como uma das metodologias consideradas convenientes para a coleta e análise do MP, além de ser a mais adequada dada a equiparação dos parâmetros do emissor e do coletor, minimizando os erros, como os já descritos acima. Além disso, como apresentado por Saushin e Goltsman (2020), o princípio apresenta-se também em outras áreas, como em escoamento multifásico, por exemplo em fluxo trifásico de óleo-gás-água.

2.2 PROBLEMA DE GRAETZ E ESTUDOS DE DEPOSIÇÃO DE PARTÍCULAS

Diante do que já foi apresentado até aqui é importante revisar as abordagens distintas usadas para se avaliar a dispersão e deposição de partículas, em especial, trabalhos anteriores que tenham abordado a mesma configuração aqui estudada ou variações do problema de Graetz.

O problema de estudo aqui proposto leva em consideração o caso do transporte de partículas em um tubo considerando convecção e difusão combinadas. Nesse tipo de situação pode se enquadrar o problema de Graetz estendido e o de L  v  que, que    uma deriva  o do problema de Graetz.

Para o problema de Graetz como comenta Basmadjian (1999) a converg  ncia    tida como r  pida para casos como: difusividade alta a moderada e di  metros pequenos, condutos longos ou velocidades baixas.

Para situa  es quando essas condi  es n  o s  o respeitadas    utilizado geralmente um m  todo conhecido como L  v  que. Neste caso, a solu  o de L  v  que concentrou sua an  lise na regi  o de entrada do tubo, descrevendo uma situa  o idealizada para ajustar a necessidade do uso

de muitos termos na série da solução de Graetz para obter-se resultados mais precisos (Newman, 1969; Basmadjian, 1999).

Vários estudos partem também da equação 4.10 para suas análises. Esta é a equação base para solução do problema de Graetz estendido na configuração adota neste texto, exemplos são os trabalhos de Tan e Chia-Jung (1970); Michelsen e Villadsen (1974); Bowen et al. (1976); Lin e Tsai (2003); Ghiaasiaan (2011); Ryzhkov (2013).

Sellars et al. (1954) também consideram um sistema com fluxo laminar e estável em um tubo redondo com perfil de velocidade totalmente desenvolvido e parabólico, bem como, para um duto plano. Dado a necessidade de se encontrar mais autovalores para a solução geral, os autores aplicaram uma transformação de variável e apresentam em seus resultados uma equação, por similaridade, que permite se obter um número maior de autovalores aplicáveis a solução do problema, em contraposição aos poucos autovalores até então disponíveis na literatura. A aproximação dos autovalores apresentada pelos autores será discutida no capítulo 6 sobre o viés das diferentes soluções apresentadas no capítulo 4.

Já a equação que descreve o problema turbulento de Graetz foi resolvida, por exemplo, por Notter e Sleicher (1972). Os autores resolveram numericamente a equação para uma faixa específica do número de Reynolds e números de Prandtl. Seus resultados numéricos demonstram estar de acordo com dados experimentais sobre taxas de transferência de calor totalmente desenvolvidas para uma certa faixa do números de Prandtl.

Tem-se também que Bowen et al. (1976) analisaram a deposição de partículas finas no fluxo laminar entre placas paralelas e em canais cilíndricos. Nesse estudo considerou-se uma reação de primeira ordem nas paredes para representar sistemas coletores de filtração. Os autores fazem o uso de funções hipergeométricas confluentes combinadas com técnicas assintóticas. Deste modo, é possível uma avaliação das soluções em série mais precisas do que as soluções dos trabalhos anteriores de Ruckenstein e Prieve (1973); Spielman e Friedlander (1974); Dahneke (1974), por exemplo.

Para Walker et al. (1979) a deposição de pequenas partículas por termoforese é estudada teoricamente para escoamento laminar em um tubo. Os autores apontam a importância prática em muitas aplicações industriais, principalmente associadas à remoção de micropartículas em um fluxo de gás laminar com uma distribuição de temperatura de parede prescrita. Os autores comentam que partículas muito pequenas apresentam dificuldades para dispositivos convencionais de limpeza de ar seco, como filtros fibrosos, ciclones e precipitadores eletrostáticos.

Ye e Pui (1990) e Chen e Pui (1995) realizaram estudos numéricos e experimentais de deposição de partículas em um tubo com fluxo laminar. A solução se deu através da resolução das equações de Navier-Stokes em coordenadas cilíndricas com o método de volume de controle e o uso algoritmo SIMPLER de Patankar (Patankar e Spalding, 1983). Os mecanismos considerados para deposição de partículas incluem impactação inercial e interceptação. Os resultados numéricos foram validados por resultados experimentais e apontam que as eficiências de deposição experimental têm boa concordância com os resultados numéricos.

Já Johnston (1994) apresenta um método de solução para o problema de Graetz para fluidos não newtonianos com condições de contorno de Dirichlet e Neumann. A metodologia de solução é similar à apresentada no capítulo 4, a diferença se dá no uso de um perfil de velocidade diferente.

Philip (1995) estudou o processo de deposição e entupimento quando um fluxo constante e com movimento browniano é introduzido em um canal estreito contendo inicialmente apenas o líquido. Neste caso, o perfil de velocidade de Poiseuille é utilizado e uma solução de similaridade é encontrada. As equações abordadas em seu texto são similares às adotadas no presente texto

para o problema de Graetz estendido. Além disso, os autores comentam que a mesma abordagem empregada por eles aplica-se igualmente à adsorção irreversível de um soluto na parede do canal.

O trabalho de [Romay et al. \(1998\)](#) faz a análise da deposição de partículas de aerossol em um tubo de aço inoxidável sob condições de fluxo laminar e turbulento. Os autores concluíram que as eficiências experimentais de deposição foram encontradas entre 1,1 e 2,0 vezes maiores do que as previsões teóricas. Além disso, justificou-se que essa discrepância pode ser atribuída a fatores não incluídos na teoria que podem envolver aprimoramento da deposição devido ao transporte turbulento de redemoinhos ou gradientes não uniformes de concentração de partículas na entrada da região de resfriamento do tubo.

Sobre o ponto de vista da amostragem isocinética, [Tyree e Allen \(2004\)](#) analisaram os efeitos de parede de forma análoga ao problema de Graetz. Os autores apontam que a perda de aerossol amostrado isocineticamente pode ser 1,8 vezes menor que o do aerossol de fluxo principal. Além disso, comentam que a eficiência da amostragem é afetada fortemente pelo número de Reynolds do fluxo principal.

Já [Walsh et al. \(2006\)](#) desenvolveram um modelo para investigar a deposição de partículas de aerossol na parede de um tubo cilíndrico relativamente frio. Os resultados indicam que mais partículas se depositam a distâncias axiais mais curtas no fluxo descendente através de um tubo vertical do que no fluxo ascendente. Esse comportamento é atribuído ao maior tempo de permanência associado ao fluxo descendente, apesar da presença de um gradiente de temperatura radial reduzido em relação à configuração ascendente.

A análise de [Rajaraman e Heys \(2014\)](#) tem como foco as propriedades do transporte e deposição de nanopartículas com uma variedade de diâmetros aerodinâmicos estudados para as vias aéreas humanas. Os autores usam várias abordagens de estabilização do esquema numérico proposto. O estudo compara a solução aproximada de cada abordagem de estabilização com a solução analítica de Graetz.

Nos trabalhos até aqui citados, diferentes abordagens do problema de Graetz foram observadas, sejam no que tange: a configuração do sistema, as condições de contorno, ao perfil de temperatura e escoamento, aos métodos numéricos empregados, bem como, o objetivo de análise. Essa breve revisão mostra que o problema de Graetz possui ampla aplicabilidade em diversas áreas da ciência.

2.3 NÚMEROS ADIMENSIONAIS ADOTADOS

Na análise adimensional busca-se reduzir o número de variáveis independentes no problema. O que tem sentido quando o número de variáveis dimensionais necessárias para descrever o fenômeno físico for menor que o número de variáveis dimensionais envolvidas. Nesse contexto, algumas variáveis são comumente aplicadas em fenômenos de transporte, como o número de Reynolds, de Schmidt, de Graetz, de Péclet. Suas definições são apresentadas a seguir, dado que são um grupo de variáveis adimensionais difundidos na literatura ([Bejan e Kraus, 2003](#); [Bird, 2002](#)) e são empregados na modelagem proposta neste trabalho.

O número de Reynolds, Re , é uma medida da razão entre as forças de inércia de um elemento fluido e os efeitos viscosos no elemento. É expressa pela relação adimensional:

$$Re = \frac{\rho \bar{U} D_h}{\mu} = \frac{\bar{U} D_h}{\nu}, \quad (2.2)$$

sendo que ρ é a densidade do fluido em $[\text{kg/m}^3]$, \bar{U} é a velocidade média do fluido em $[\text{m/s}]$, D_h é o diâmetro hidráulico do tubo em $[\text{m}]$ (nota-se que para tubos circulares $D_h \equiv 2R$, onde R é o

raio), e μ é a viscosidade dinâmica do fluido em [kg/m.s]. Nota-se que a viscosidade cinemática ν é equivalente a (μ/ρ) , e é dado em [m²/s].

O número de Schmidt, Sc , é definido como a razão da viscosidade cinemática e o coeficiente de difusão, e é usada para caracterizar fluxos de fluidos nos quais existem simultaneamente processos de difusão de momento e de massa. Este número adimensional pode ser expresso por (onde D é a difusividade de massa em [m²/s]):

$$Sc = \frac{\nu}{D} = \frac{\mu}{\rho D} \quad (2.3)$$

O número de Graetz, Gz , é usado para caracterizar o fluxo num tubo, relacionando as forças de inércia, os efeitos difusivos, o comprimento do tubo e o diâmetro hidráulico, e é definido pela equação:

$$Gz = \frac{D_h}{L} Re Sc \quad (2.4)$$

sendo que L é o comprimento do tubo.

O número de Péclet, Pe , é uma variável adimensional e relaciona a taxa entre o transporte convectivo e o difusivo, expresso pela relação:

$$Pe = \frac{D_h \bar{U}}{D} = \frac{2R\bar{U}}{D} \quad (2.5)$$

Além disso, pode-se estabelecer inter-relações entre os números adimensionais, como por exemplo $Pe = Re Sc$, e neste contexto pode-se escrever também o número de Graetz como:

$$Gz = \frac{D_h}{L} Re Sc = \frac{D_h}{L} Pe \quad (2.6)$$

$$Gz = \frac{D_h}{L} \left(\frac{D_h \bar{U}}{D} \right) \quad (2.7)$$

2.4 COEFICIENTE DE DIFUSÃO

Um parâmetro importante para a estimativa da taxa de deposição do MP em um escoamento é o seu coeficiente de difusão (\mathcal{D}) e conforme descrito no capítulo 4 este termo será considerado constante. Os valores aplicados neste estudo e descritos nessa seção são calculados considerando os diâmetro do MP, de modo a prover mais realismo aos resultados obtidos da taxa de deposição e na dispersão das partículas.

As partículas de MP são transportadas pelos processos de difusão e advecção. O coeficiente de difusão é representado pela equação:

$$\mathcal{D} = \frac{kTC_c}{3\pi\mu D_p} \quad (2.8)$$

Na equação 2.8 o coeficiente de difusão é apresentado em função do tamanho da partícula, D_p em [m], conforme apresentado por [Flagan e Seinfeld \(2012\)](#); [Tan e Chia-Jung \(1970\)](#). Nesta equação, k representa a constante de Boltzmann em [J/K], T é a temperatura em [K], μ é a viscosidade dinâmica do ar em [Kg/m.s] e C_c é o valor do fator de correção de Cunningham, adimensional, do escorregamento para o ar e dado em função do diâmetro das partículas D_p ([Flagan e Seinfeld, 2012](#), p. 296).

¹A equação 2.8 é também conhecida como equação de Stokes-Einstein.

Partindo-se da Lei de Stokes, que considera que não há deslizamento entre as gás e as partículas de aerossol em um meio contínuo, é necessário atentar-se que quando a partícula está ficando cada vez menor (aproximando-se do caminho livre médio das moléculas de gás) esta suposição de transporte contínuo não é mais válida. Logo, um parâmetro adimensional que define a natureza do aerossol se torna importante, este é o número Knudsen (Kn). Este número é a razão de duas escalas de comprimento, ou seja, a razão entre o caminho livre médio do gás e o raio da partícula [Flagan e Seinfeld \(2012\)](#); [Tan \(2014\)](#).

Para gases o número de Knudsen pode ser representado pela equação a seguir, onde λ_g é o caminho livre médio² do fluido (gases) e L é a escala de comprimento representativa considerada. Salienta-se que o número de Knudsen aqui é dado em função do diâmetro da partícula D_p . Para [Nguyen et al. \(2019\)](#) o número de Knudsen tem fundamental importância na dinâmica dos gases já que fornece uma medida do quão rarefeito é um fluxo, ou quão baixa é a densidade, em relação à escala de comprimento do fluxo, dado por:

$$\text{Kn} = \frac{\lambda_g}{L} = \frac{2\lambda_g}{D_p} \quad (2.9)$$

[Seinfeld e Pandis \(2016\)](#); [Tan \(2014\)](#) comentam que quando $\text{Kn} \ll 1$, considera-se que a partícula está no regime contínuo dado que o diâmetro da partícula é muito maior do que o caminho livre médio, e as equações usuais da mecânica do contínuo se aplicam. Quando $\text{Kn} \gg 1$ o caminho livre médio das moléculas de gás excede substancialmente o raio da partícula, ou seja, a partícula existe em uma forma mais ou menos rarefeita meio e suas propriedades de transporte podem ser obtidas a partir da teoria cinética dos gases. O tamanho da partícula entre esses dois extremos define o regime de transição.

$$\lambda_g = \frac{R^*T}{\sqrt{2}\pi N_a d_g^2 p} = \frac{M}{\sqrt{2}\pi N_a d_g^2 \rho} \quad (2.10)$$

Salienta-se que o caminho livre médio, aqui definido como λ_g (equação 2.10), é calculado a partir da teoria cinética dos gases ([Seinfeld e Pandis, 2016](#); [Tan, 2014](#)). Sendo que p é a pressão, M é o peso molecular e d_g é o diâmetro da molécula de gás (fixados para um gás em estado estável ([Tan, 2014](#))), R^* é a constante universal dos gases molecular, N_a é a constante de Avogadro e ρ é a densidade do gás.

O caminho livre médio das moléculas para o ar com $T = 298 \text{ K}$, $P = 1 \text{ atm}$ (101325 [Pa]), $N_a = 6,0221 \times 10^{23} \text{ [1/mol]}$, $R^* = 8,314 \text{ [J/mol K]}$, $d_g = 0,37 \text{ [nm]}$ e $\rho = 1,2 \text{ [kg/m}^3\text{]}$ ([Bejan e Kraus, 2003](#); [Tan, 2014](#)). Logo tem-se que $\lambda_g = 6,675 \times 10^{-8} \text{ [m]}$ ou $\lambda_g = 0,0668 \text{ [}\mu\text{m]}$.

Para o fator de correção C_c sua aproximação pode ser estabelecida pela relação apresentada por [Seinfeld e Pandis \(2016\)](#); [Tan \(2014\)](#), conforme:

$$C_c = 1 + \text{Kn} \left[1,257 + 0,40e^{-\frac{1,10}{\text{Kn}}} \right] \quad (2.11)$$

Com base nas equações 2.8, 2.9, 2.10 e 2.11 foi possível estabelecer os seguintes parâmetros para alguns diâmetros de partículas a serem aplicados nos resultados aqui apresentados, sendo constante de Boltzmann é igual a $k = 1,38054 \times 10^{-23} \text{ [J/K]}$, já a viscosidade dinâmica do ar seco é $\mu = 1,8 \times 10^{-5} \text{ [Kg/m.s]}$ e considerando o ar a 1 [atm] (101,325 [kPa]) e a 298 [K] ([Bejan e Kraus, 2003](#)).

Os valores do coeficiente de difusão calculados, com base nas equações e nos dados acima, são ilustrados na Tabela 2.1, com destaque para as partículas de MP₁₀ e MP_{2,5}.

²É a razão da distância percorrida pelo número de colisões ([Tan, 2014](#)).

Tabela 2.1: Coeficientes de difusão calculado para diferentes diâmetros de partículas

D_p [μm]	Kn	C_c	\mathcal{D} [m^2/s]
0,1	1,335	2,913	$7,064 \times 10^{-10}$
0,5	0,267	1,337	$6,485 \times 10^{-11}$
1,0	0,134	1,168	$2,832 \times 10^{-11}$
1,5	0,089	1,112	$1,798 \times 10^{-11}$
2,0	0,067	1,084	$1,314 \times 10^{-11}$
2,5	0,053	1,067	$1,035 \times 10^{-11}$
3,0	0,045	1,056	$8,536 \times 10^{-12}$
3,5	0,038	1,048	$7,261 \times 10^{-12}$
4,0	0,033	1,042	$6,317 \times 10^{-12}$
4,5	0,030	1,037	$5,588 \times 10^{-12}$
5,0	0,027	1,034	$5,015 \times 10^{-12}$
5,5	0,024	1,031	$4,546 \times 10^{-12}$
6,0	0,022	1,028	$4,155 \times 10^{-12}$
6,5	0,021	1,026	$3,828 \times 10^{-12}$
7,0	0,019	1,024	$3,548 \times 10^{-12}$
7,5	0,018	1,022	$3,305 \times 10^{-12}$
8,0	0,017	1,021	$3,095 \times 10^{-12}$
8,5	0,016	1,020	$2,910 \times 10^{-12}$
9,0	0,015	1,019	$2,746 \times 10^{-12}$
9,5	0,014	1,018	$2,599 \times 10^{-12}$
10,0	0,013	1,017	$2,466 \times 10^{-12}$

3 METODOLOGIA DE ANÁLISE

A metodologia aplicada neste trabalho consiste numa avaliação da modelagem matemática e da simulação numérica do problema da dispersão e deposição de MP em um tubo com escoamento permanente e plenamente desenvolvido. O fenômeno de interesse é conhecido como problema de Graetz Estendido, descrito por [Flagan e Seinfeld \(2012\)](#) em seu Apêndice B. No presente texto, a dedução das soluções analíticas é descrita no capítulo 4 (detalhes da modelagem podem ser encontrados no apêndice B). A modelagem perpassa por uma série de métodos que incluem: a delimitação da equação geral do problema utilizando coordenadas cilíndricas, o método de separação de variáveis, a utilização de números adimensionais, o problema de Sturm-Liouville, o método de Frobenius e as funções hipergeométricas. O apêndice A apresenta uma descrição sucinta do Método de Frobenius, das Funções hipergeométricas confluentes e do Problema de Sturm-Liouville.

No capítulo 5 o mesmo problema é tratado numericamente com as mesmas condições de contorno do caso analítico. Propõe-se, em seguida, uma nova condição de contorno na entrada do tubo. Para as soluções numéricas aplica-se o esquema de diferenças finitas denominado Crank-Nicolson com o auxílio do método TDMA. A solução computacional permite obter soluções comparáveis à modelagem analítica e numa outra configuração, o que pode permitir explorar o problema utilizando um experimento de bancada em projetos futuros.

Por fim uma discussão entre os resultados analítico e numérico é apresentada para verificar o potencial da modelagem e dos resultados obtidos nas configurações analisadas.

Os passos adotados na metodologia foram sintetizados na Figura 3.1.

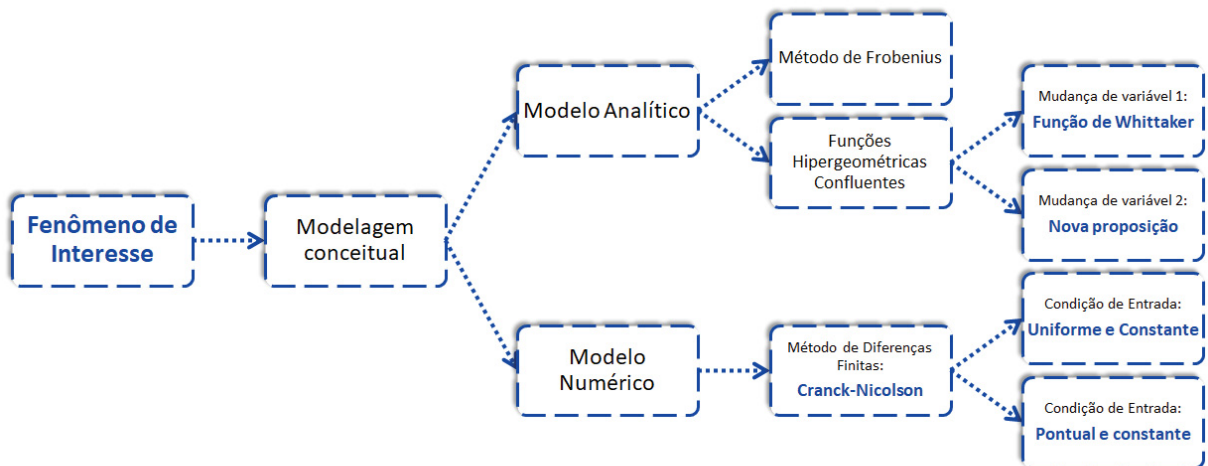


Figura 3.1: Fluxograma síntese da metodologia adotada

4 MODELAGEM MATEMÁTICA

A complexidade dos fenômenos físicos que envolvem transferência de calor e massa podem requerer abordagens distintas de acordo com o problema. Quando se trata da análise da dispersão e deposição de MP em um fluido, o princípio físico fundamental que rege o comportamento deste fenômeno é a conservação da massa.

Nesse contexto, a transferência de massa pode ser entendida como um processo de transporte onde existe a migração de uma ou mais substâncias químicas em um dado meio na existência de um gradiente de concentração. Os mecanismos que regem este transporte são os de advecção e difusão, onde a difusão está associada diretamente ao gradiente presente entre dois pontos num dado sistema e advecção está associada às condições de escoamento do fluido (Bejan e Kraus, 2003).

A modelagem descrita neste capítulo versa sobre a deposição de partículas e é analisada em um tubo circular simétrico com fluxo laminar plenamente desenvolvido. A adoção dessa abordagem possibilita uma análise da deposição de forma analítica e numérica partindo do problema de Graetz estendido.

4.1 O PROBLEMA DE GRAETZ ESTENDIDO PARA DEPOSIÇÃO DE PARTÍCULAS

O problema de Graetz recebeu este nome em homenagem ao físico alemão Leo Graetz, que disserta em sua publicação sobre a condutividade térmica e analisa a troca de calor num tubo com perfil de velocidade constante (Graetz, 1882). A transferência de calor entre um fluido e a parede de um tubo pode ser generalizada para diversas aplicações e sua solução tem sido frequentemente pesquisada em diferentes abordagens, por exemplo, as descritas na seção 2.2.

Utilizando o método de separação de variáveis, juntamente com o problema de Sturm-Liouville, Graetz (1882) avaliou dois autovalores da equação, e anos depois, novos autovalores foram sendo encontrados dado a maior disponibilidade de cálculo, principalmente por meios computacionais mais robustos.

Para Campo (2020) a característica notável da série infinita de Graetz é sua convergência em diferentes distâncias axiais. Sendo que próximo da região de entrada do escoamento o número de termos da série deve aumentar significativamente, fato este que torna-se característica pouco atraente para a efetiva aplicação da série.

Pela similaridade entre os processos que envolvem a transferência de massa e de calor, é possível tratar o problema de modo matematicamente equivalente como proposto por Flagan e Seinfeld (2012). O autor analisou a deposição de aerossóis na parede de um tubo cilíndrico em um fluxo laminar constante baseando-se no problema de Graetz. Neste contexto, considera-se que quando uma partícula encontra a parede, ela é removida permanentemente do fluxo, deste modo, na saída do tubo obtém-se o fluxo de partículas que emergem do escoamento descontando o que foi removido pela parede.

A interpretação física descrita acima é dada por intermédio de uma idealização do fenômeno de deposição de MP. De modo que, sua adoção não inviabiliza a significância dos resultados e conclusões descritas ao longo da dedução da seção 4.1.1 mesmo não sendo uma representação fisicamente precisa do problema. Logo os resultados podem ser discutidos de uma maneira a fornecer uma interpretação do fenômeno proposto onde o objetivo é entender o comportamento da dispersão e deposição de MP. A modelagem revisita o problema clássico de Graetz e resolve-o de forma aproximada e analítica por diferentes caminhos.

4.1.1 Modelagem da solução analítica

A modelagem analítica apresentada nesta seção para obtenção da solução geral parte da equação de advecção-difusão, que é a equação governante do fenômeno de transporte que rege o problema de estudo. A incógnita do problema, C , representa a concentração das partículas, dada em $\mu\text{g}/\text{m}^3$. Considera-se que o fluido é incompressível e a equação de advecção-difusão é descrita em coordenadas cartesianas (x, y, z) e sem a presença de um termo fonte. O vetor velocidade \mathbf{U} é descrito em termos das suas componentes nas direções x , y e z , $\mathbf{U} = (u, v, w)$. Além disso, \mathcal{D}_x , \mathcal{D}_y e \mathcal{D}_z representam os coeficientes de difusão em cada direção x , y e z , respectivamente.

$$\frac{\partial C}{\partial t} + u \frac{\partial C}{\partial x} + v \frac{\partial C}{\partial y} + w \frac{\partial C}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\mathcal{D}_x \frac{\partial C}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\mathcal{D}_y \frac{\partial C}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\mathcal{D}_z \frac{\partial C}{\partial z} \right) \quad (4.1)$$

Uma solução analítica para a equação 4.1 pode ser obtida se adotarmos hipóteses simplificadoras. Essas hipóteses vão desde: considerar o escoamento em uma, duas ou três dimensões; considerar apenas a advecção ou apenas a difusão; mudar as coordenadas, dentre outras hipóteses ou uma combinação das mesmas. [Socolofsky e Jirka \(2005\)](#), por exemplo, apresentam em seu texto várias deduções de casos específicos com hipóteses simplificadoras diferentes.

Para este trabalho será adotado um modelagem similar ao Problema de Graetz, conforme ilustrado na Figura 4.1. Deste modo a direção z coincide com o eixo de simetria axial do tubo e sendo R é o raio do tubo.

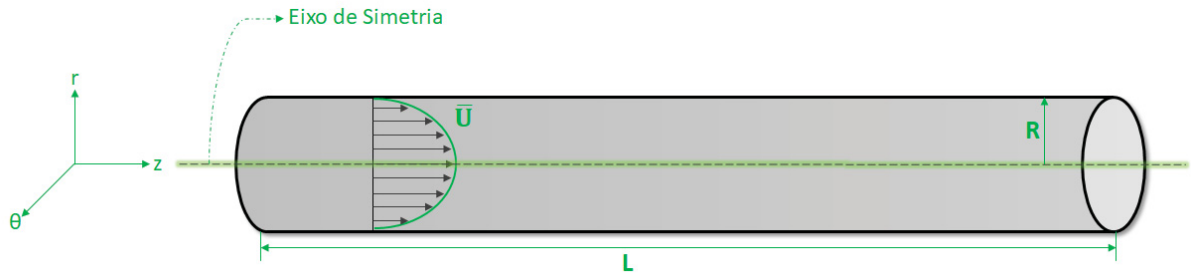


Figura 4.1: Geometria do tubo em coordenadas cilíndricas

Por simplicidade, será considerado o caso de escoamento laminar onde $\mathbf{U} = (0, 0, w)$, ou seja, caso no qual a velocidade é dita significativa apenas no eixo z e tem componente nesta direção igual a w . Além disso, será considerado o caso isotrópico, onde os coeficientes de difusão em cada direção são iguais, logo $\mathcal{D}_x = \mathcal{D}_y = \mathcal{D}_z = \mathcal{D}$. Deste modo, a equação 4.1 pode ser simplificada para:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + w \frac{\partial C}{\partial z} = \mathcal{D} \left(\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} \right) \quad (4.2)$$

Como o tubo tem simetria axial é conveniente para esta modelagem utilizar-se de um novo sistema de coordenadas, o sistema de coordenadas cilíndricas. Na seção B.1 do apêndice é apresentado o procedimento de troca de variáveis do sistema retangular para o sistema cilíndrico.

A distribuição de velocidades é dada pela Equação de Poiseuille em que \bar{U} é a velocidade média do fluido e r é a direção radial:

$$w = 2\bar{U} \left(1 - \frac{r^2}{R^2} \right) \quad (4.3)$$

Fazendo a mudança de variáveis conforme explicado no apêndice B e usando a distribuição de velocidade dada pela relação 4.3, tem-se a equação diferencial para $C = C(r, \theta, z)$:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + 2\bar{U} \left(1 - \frac{r^2}{R^2} \right) \frac{\partial C}{\partial z} = \mathcal{D} \left[\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial C}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 C}{\partial \theta^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} \right] \quad (4.4)$$

Considerando o escoamento plenamente desenvolvido, então $\frac{\partial C}{\partial t} = 0$. As variáveis independentes são limitadas ao domínio do problema: $0 \leq r \leq R$ e $0 \leq z \leq L$, onde L é o comprimento do tubo e que para este estudo considera-se que $L \gg R$. Além disso, dado a existência de simetria axial então $\frac{\partial C}{\partial \theta} = 0$ por definição, logo o termo $\frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 C}{\partial \theta^2} = 0$, o que faz com que a equação seja simplificada para:

$$2\bar{U} \left(1 - \frac{r^2}{R^2} \right) \frac{\partial C}{\partial z} = \mathcal{D} \left[\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial C}{\partial r} \right) + \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} \right] \quad (4.5)$$

Para a equação 4.5¹ e considerando as condições de contorno/inicial dadas por:

$$\begin{aligned} \text{Entrada: } C(r, 0) &= C_0 \\ \text{Parede: } C(R, z) &= C_p = 0 \\ \text{Linha central: } C(0, z) &\text{ é finito ou } \frac{\partial C}{\partial r} \Big|_{r=0} = 0 \end{aligned} \quad (4.6)$$

onde C_0 é a concentração constante na entrada do tubo e C_p a concentração constante na parede do tubo que neste estudo será zero, como pode ser visualizado na Figura 4.2.

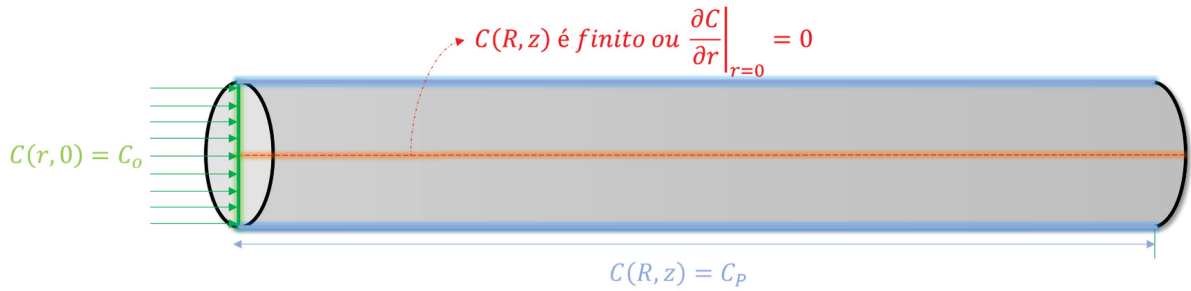


Figura 4.2: Condições de contorno do Problema de Graetz Estendido

Na entrada, a condição de contorno $C(r, 0) = C_0$ indica que a concentração é constante e uniforme ao longo da direção axial, na parede considera-se $C_p = 0$. Já para a condição na parede considera-se concentração constante, fisicamente pode-se interpretar nessa região como um sumidouro infinito de partículas. E conforme Bowen et al. (1976) essa suposição a priori de que a parede se comporta como um coletor de partículas perfeito é uma característica de todos os problemas de deposição, independentemente da interação específica da superfície (se houver) que está sendo considerada.

¹Deste modo C é dado em função apenas de duas variáveis, logo $C(r, z)$

A presença do termo de difusão axial na equação 4.5 significa que é necessária outra condição de contorno na coordenada z , que é dada pela condição na linha central (condição de simetria).

As variáveis da equação 4.5 podem ser reescritas pelas relações adimensionais:

$$\tilde{C} = \frac{C - C_p}{C_0 - C_p} \quad \tilde{Y} = \frac{r}{R} \quad \tilde{Z} = \frac{z}{R \text{ Pe}} \quad (4.7)$$

Deste modo a equação 4.5 é expressa por:

$$(1 - \tilde{Y}^2) \frac{\partial \tilde{C}}{\partial \tilde{Z}} = \frac{1}{\tilde{Y}} \frac{\partial}{\partial \tilde{Y}} \left(\tilde{Y} \frac{\partial \tilde{C}}{\partial \tilde{Y}} \right) + \frac{1}{\text{Pe}^2} \frac{\partial^2 \tilde{C}}{\partial \tilde{Z}^2} \quad (4.8)$$

Já as condições de contorno 4.6, adimensionais, são expressas por:

$$\begin{aligned} \text{Entrada: } \tilde{C}(\tilde{Y}, 0) &= 1 \\ \text{Parede: } \tilde{C}(1, \tilde{Z}) &= 0 \\ \text{Linha central: } \tilde{C}(0, \tilde{Z}) &\text{ é finito ou } \frac{\partial \tilde{C}}{\partial \tilde{Y}} = 0 \text{ em } \tilde{Y} = 0 \end{aligned} \quad (4.9)$$

Adotando valores para R , U , \mathcal{D} de modo que $\text{Pe} \gg 100$, tem-se que $\frac{1}{\text{Pe}^2} \ll 1$. Então a equação 4.8 pode ser reescrita como:

$$(1 - \tilde{Y}^2) \frac{\partial \tilde{C}}{\partial \tilde{Z}} = \frac{1}{\tilde{Y}} \frac{\partial}{\partial \tilde{Y}} \left(\tilde{Y} \frac{\partial \tilde{C}}{\partial \tilde{Y}} \right) \quad (4.10)$$

A equação 4.10 é a base para determinação das concentrações dentro do tubo. Esta equação possui solução analítica e para se resolver essa equação usa-se uma sequência de métodos associados, no qual o primeiro deles é o método de separação de variáveis.

Como apresentado no apêndice B.2 o uso da a separação de variáveis resulta numa igualdade que permite escrever a equação como uma constante de separação independente² de ζ e β (funções para separação de variáveis). Assim, é possível reescrever a equação 4.10 como:

$$\frac{1}{\zeta} \frac{d\zeta}{d\tilde{Z}} = \frac{1}{\beta(1 - \tilde{Y}^2)} \frac{1}{\tilde{Y}} \frac{d}{d\tilde{Y}} \left(\tilde{Y} \frac{d\beta}{d\tilde{Y}} \right) = -\lambda^2 \quad (4.11)$$

A equação 4.11 pode ser reescrita na forma das equações diferenciais ordinárias.

$$\frac{d\zeta}{d\tilde{Z}} + \lambda^2 \zeta = 0 \quad (4.12)$$

$$\frac{d}{d\tilde{Y}} \left(\tilde{Y} \frac{d\beta}{d\tilde{Y}} \right) + \lambda^2 (1 - \tilde{Y}^2) \tilde{Y} \beta = 0 \quad (4.13)$$

É simples ver que a solução da equação 4.12 é dada integrando ambos os lados. De modo que a solução da mesma pode ser escrita na forma de:

$$\zeta(\tilde{Z}) = e^{-\lambda^2 \tilde{Z}} \quad (4.14)$$

onde a constante de integração é igual a unidade aplicando-se a condição inicial ($\tilde{C}(\tilde{Y}, 0) = 1$).

²Por opção, definiu-se que a constante de separação de variáveis é dada sobre a forma de $-\lambda^2$. Essa condição negativa de λ visa garantir que a relação $C - C_p$ diminua conforme $\tilde{Z} \rightarrow \infty$, ou seja, evita que \tilde{C} aumente sem limite já que isso contradiria fisicamente o problema.

Cabe salientar que [Flagan e Seinfeld \(2012\)](#) apresentou a partir daqui uma solução com base na função hipergeométrica confluyente apresentada por [Abramowitz e Stegun \(1965\)](#). Uma outra abordagem alternativa apresentada na literatura é utilizada por [Rice e Do \(1994\)](#) que analisa a equação 4.13 sobre outro aspecto, que toma por base os métodos detalhados a seguir.

A equação 4.13 pode ser analisada como um problema se Sturm-Liouville onde as condições de contorno 4.9 (já ajustadas) são reescritas, usando a separação de variáveis, na forma de:

$$\begin{aligned} \text{Parede: } \beta(1) &= 0 \\ \text{Linha central: } \beta(0) &\text{ é finito ou } \frac{d\beta}{d\tilde{Y}} = 0 \text{ em } \tilde{Y} = 0 \end{aligned} \quad (4.15)$$

Como pode ser verificado na seção A.3 a equação 4.13 é uma equação de Sturm-Liouville com $P(\tilde{Y}) = \tilde{Y}$, $Q(\tilde{Y}) = 0$ e $S(\tilde{Y}) = \tilde{Y}(1 - \tilde{Y}^2)$, sendo $S(\tilde{Y})$ denominada de função peso. As condições de contorno dadas por 4.15 que também são do tipo de Sturm-Liouville. As funções $P(\tilde{Y})$, $Q(\tilde{Y})$ e $S(\tilde{Y})$ são contínuas no intervalo $[0,1]$. e são atendidas as propriedades do do teorema de Sturm-Liouville.

4.1.2 Solução aplicando o método de Frobenius de forma direta

Identificado a equação 4.13 como uma equação de Sturm-Liouville a solução da mesma pode ser obtida aplicando o método de Frobenius como pode-se verificar na seção A.1 e que é detalhada para a equação 4.13 na seção B.3.

Aplicando o método na equação 4.13 obteve-se um único valor para o índice variável, $j = 0$. O passo seguinte, foi encontrar a relação de recorrência para determinação da série resultante. Neste caso encontrou-se que os termos ímpares são nulos e a relação de recorrência, definida na seção B.3, permite obter os termos pares da série, sendo:

$$G_z(\tilde{Y}, \lambda) = \left[1 - \left(\frac{\lambda^2}{4} \right) \tilde{Y}^2 + \frac{\lambda^2}{16} \left(1 + \frac{\lambda^2}{4} \right) \tilde{Y}^4 + \dots \right] \quad (4.16)$$

A série 4.16 é resultante da aplicação do método de Frobenius, onde $\beta(\tilde{Y}) = G_z(\tilde{Y}, \lambda)$. Usando as condições de contorno na parede, tem-se que $G_z(1, \lambda) = 0$ verifica-se que existem n possibilidades para o valor de λ . Logo, tem-se que para cada λ_n existe uma função de Graetz $G_{z_n}(\tilde{Y}, \lambda_n)$ que satisfaz a solução do problema. Além disso, λ_n e $G_{z_n}(\tilde{Y}, \lambda_n)$ são respectivamente os autovalores e autofunções do problema de Sturm-Liouville, bem como, A_n é uma constante do problema associada a cada autovalor. Logo, combinando as soluções para $\zeta(\tilde{Z})$ e $\beta(\tilde{Y})$ a solução geral, aplicando o método de Frobenius de forma direta, é dada por:

$$\tilde{C}(\tilde{Z}, \tilde{Y}) = \sum_{n=0}^{\infty} A_n G_{z_n}(\tilde{Y}) e^{(-\lambda_n^2 \tilde{Z})} \quad (4.17)$$

Como apresentado por [Tyree e Allen \(2004\)](#); [Abramowitz e Stegun \(1965\)](#); [Bowen et al. \(1976\)](#) a solução geral aplicada ao problema proposto possui o mesmo formato da equação 4.17.

4.1.3 Solução aplicando aproximações assintóticas - Função de Whittaker

Uma função hipergeométrica confluyente é uma solução de uma equação hipergeométrica confluyente que tem duas das três singularidades regulares fundidas em uma singularidade irregular.

Considerando $\mathcal{W} = \mathcal{W}(t)$ uma função arbitrária, e sendo κ e ς parâmetros desta equação, tem-se que a equação de Whittaker geral é dada por (Abramowitz e Stegun, 1965):

$$\frac{d^2 \mathcal{W}}{dt^2} + \left(\frac{1/4 - \varsigma^2}{t^2} + \frac{\kappa}{t} - \frac{1}{4} \right) \mathcal{W} = 0 \quad (4.18)$$

A solução geral para a equação 4.18 é dada por:

$$\mathcal{W}(t) = A e^{-\frac{1}{2}t} t^{(\frac{1}{2}+\varsigma)} M(a, c, t) + B e^{-\frac{1}{2}t} t^{(\frac{1}{2}+\varsigma)} U(1+a-c, 2-c, t) \quad (4.19)$$

sendo que $a = \frac{1}{2} - \kappa + \varsigma$ e $c = 1 + 2\varsigma$.

Para a aplicação deste método na equação 4.13 é necessário realizar uma transformação de variáveis, onde $\chi = \lambda_n \tilde{Y}^2$ e $\psi = \tilde{Y} \beta$ (Apêndice B.4), resultando em:

$$\frac{d^2 \psi_n}{d\chi_n^2} + \left[\frac{1}{4\chi_n^2} + \frac{\lambda_n}{4\chi_n} - \frac{1}{4} \right] \psi_n = 0 \quad (4.20)$$

Olhando-se para a equação 4.20 como uma equação na forma de equação 4.18 tem-se que $\kappa = \frac{\lambda_n}{4}$ e $\varsigma = 0$ e consequentemente $a = \frac{2-\lambda_n}{4}$ e $c = 1$.

Aplicando o resultado na equação A.15 e usando a condição de contorno na linha central 4.15 é possível verificar que $B = 0$. Assim, a solução por linearidade fica dependendo apenas da função hipergeométrica de primeiro tipo.

A diferença da aplicação direta do método de Frobenius está na obtenção de uma série diferente partindo-se da equação 4.20. Para diferenciar as soluções, aqui será adotado G_{z_n} para a série obtida pelo método de Frobenius e $G_{z_n}^*$ para a série obtida utilizando a função de Whittaker, bem como, \tilde{C} e \tilde{C}^* (sendo que o asterisco indica a solução utilizando a função de Whittaker) e assim a solução geral é representada por:

$$\tilde{C}^*(\tilde{Z}, \tilde{Y}) = \sum_{n=0}^{\infty} A_n G_{z_n}^*(\tilde{Y}) e^{(-\lambda_n^2 \tilde{Z})} \quad (4.21)$$

com:

$$G_{z_n}^*(\tilde{Y}) = e^{-\frac{\lambda_n \tilde{Y}^2}{2}} \lambda_n^{\frac{1}{2}} M\left(\frac{2-\lambda_n}{4}, 1, \lambda_n \tilde{Y}^2\right) \quad (4.22)$$

Salienta-se que obtenção da equação 4.22 foi obtida retornando-se a variável original do problema antes da transformação de variável.

4.1.4 Novo caminho para resolução do problema

Uma nova solução é proposta e testada, com base nas mesmas premissas adotadas anteriormente, partindo-se da equação 4.10. A diferença da nova proposta de solução encontra-se na resolução da equação diferencial ordinária de segunda ordem que está associada à variável adimensional radial obtida após o método de separação de variáveis, ou seja, a equação 4.13.

A solução aqui proposta também ancora-se em um grupo de resoluções analíticas baseadas em funções hipergeométricas confluentes e baseia-se nas deduções apresentadas por Bateman (1953). Sendo que na literatura não foi encontrado sua aplicação ao problema de Graetz, bem como, ao problema de Graetz estendido.

Em sua publicação [Bateman \(1953\)](#) apresenta um grupo de soluções para solução de uma equação diferencial ordinária de segunda ordem, partindo-se da relação geral expressa pela equação:

$$(a_2x + b_2) \frac{d^2y}{dx^2} + (a_1x + b_1) \frac{dy}{dx} + (a_0x + b_0)y = 0 \quad (4.23)$$

A equação 4.23 é uma equação diferencial linear homogênea de segunda ordem cujos coeficientes são funções lineares da variável independente. Pode ser mostrado que a equação diferencial ordinária pode ser integrada e a solução se dá em termos de funções hipergeométricas confluentes ([Bateman, 1953](#); [Polyanin e Zaitsev, 2002](#)). Por exemplo, é trivial observar que se $a_0 = a_1 = a_2 = 0$, a equação tem coeficientes constantes e pode ser integrada diretamente para a obtenção da solução.

Nos demais casos para a resolução adota-se uma transformação de variáveis de modo que $x = \varphi t + \varrho$, onde φ e ϱ são constantes e $\varphi \neq 0$. Adota-se também que a solução está na forma de $y = e^{kt} \mathcal{G}(t)$, logo tal transformação permite deduzir uma equação na seguinte forma:

$$(A_2t + B_2) \frac{d^2\mathcal{G}}{dt^2} + (A_1t + B_1) \frac{d\mathcal{G}}{dt} + (A_0t + B_0) \mathcal{G} = 0 \quad (4.24)$$

Os coeficientes desta nova equação são deduzidos detalhadamente por [Bateman \(1953\)](#); [Zaitsev e Polyanin \(2002\)](#). E nesse sentido, os autores afirmam que se for possível determinar φ , ϱ e k é possível obter soluções para alguns casos destas constantes, conforme descrito na Tabela 4.1.

Com base na equação 4.13 efetuando a mudança de variável $v = \tilde{Y}^2$ tem-se a nova equação:

$$4v^2 \frac{d^2\beta}{dv^2} + 4 \frac{d\beta}{dv} + \lambda^2 (1 - v) \beta = 0 \quad (4.25)$$

Na equação 4.25 podem ser identificados os parâmetros: $a_2 = 4$, $b_2 = 0$, $a_1 = 0$, $b_1 = 4$, $a_0 = -\lambda^2$ e $b_0 = \lambda^2$. Logo aplicando as relações da Tabela 4.1 e voltando-se a variável original tem-se a nova solução da série, denotada por $Gz_n^\#$ e a solução geral pela nova mudança denotada por $\tilde{C}^\#$.

$$\tilde{C}^\#(\tilde{Z}, \tilde{Y}) = \sum_{n=0}^{\infty} A_n Gz_n^\#(\tilde{Y}) e^{(-\lambda_n^2 \tilde{Z})} \quad (4.26)$$

com:

$$Gz_n^\#(\tilde{Y}) = e^{\frac{\lambda_n \tilde{Y}^2}{2}} M\left(\frac{2 + \lambda_n}{4}, 1, -\lambda_n \tilde{Y}^2\right) \quad (4.27)$$

Nota-se que a solução assemelha-se com a solução apresentada na seção 4.1.3. Os seus resultados serão comparados com os demais soluções a fim de verificar sua aplicabilidade, dado que este caminho é um caminho mais geral e pode abranger outras configurações de parâmetros da equação diferencial de segunda ordem analisada, de forma mais simplificada.

Na Tabela 4.1, tem-se que $D = a_1^2 - 4a_0a_2$ e $B(k) = b_2k^2 + b_1k + b_0$, além disso \mathcal{J} representa a solução geral da função hipergeométrica confluenta apresentada na equação A.15. Tem-se também que a função Z_v é uma solução arbitrária de Bessel ([Zaitsev e Polyanin, 2002](#); [Bateman, 1953](#))

Tabela 4.1: Soluções da equação 4.23 para diferentes valores dos parâmetros determinantes

Constantes	k	φ	ϱ	\mathcal{G}	Parâmetros
$a_2 \neq 0$ $a_1^2 \neq 4a_0a_2$	$\frac{\sqrt{D}-a_1}{2a_2}$	$-\frac{a_2}{2a_2k+a_1}$	$-\frac{b_2}{a_2}$	$\mathcal{J}(a, b; z)$	$a = B(k)/(2a_2k + a_1)$ $b = (a_2b_1 - a_1b_2) a_2^{-2}$
$a_2 = 0$ $a_1 \neq 0$	$-\frac{a_0}{a_1}$	1	$-\frac{2b_2k+b_1}{a_1}$	$\mathcal{J}\left(a, \frac{1}{2}; \beta z^2\right)$	$a = B(k)/(2a_1),$ $\beta = -a_1/(2b_2)$
$a_2 \neq 0$ $a_1^2 = 4a_0a_2$	$-\frac{a_1}{2a_2}$	a_2	$-\frac{b_2}{b_1}$	$z^{\nu/2} Z_{\nu}(\beta\sqrt{z})$	$\nu = 1 - (2b_2k + b_1) a_2^{-1}$ $\beta = 2\sqrt{B(k)}$
$a_2 = a_1 = 0$ $a_0 \neq 0$	$-\frac{b_1}{2b_2}$	1	$\frac{b_1^2-4b_0b_2}{4a_0b_2}$	$z^{1/2} Z_{1/3}(\beta z^{3/2})$	$\beta = \frac{2}{3} \left(\frac{a_0}{b_2}\right)^{1/2}$

Fonte: Adaptado de Bateman (1953); Zaitsev e Polyanin (2002)

4.1.5 Cálculo do coeficiente A_n

Resta agora, na equação 4.17, determinar os coeficientes A_n que satisfazem a solução e validar a própria condição de ortogonalidade necessária do problema de Sturm-Liouville.

Considerando inicialmente que β_n e β_m são autofunções da solução da equação diferencial expressa em 4.13, e seguindo a detalhamento apresentado no apêndice B.5 tem-se que associando B.58 e B.61, é possível obter-se uma expressão direta para cálculo do termo A_n , expressa por:

$$A_n = -\frac{2}{\lambda_n \left(\frac{d\beta_m}{d\lambda_m} \right)_{m=n \text{ e } \tilde{Y}=1}} \quad (4.28)$$

onde β_n é substituído por Gz_n , Gz_n^* ou $Gz_n^\#$ de acordo com o método aplicado.

4.2 CÁLCULO DA CONCENTRAÇÃO MÉDIA

A questão agora é obter a taxa de deposição. Para esta estimativa parte-se da concentração média na seção de tubo. Isso pode ser entendido como a concentração média de partículas a uma distância da entrada ao longo do eixo axial do tubo, ou seja, a fração de partículas que sobrevivem à deposição na parede. Em coordenada retangulares, essa contração pode ser expressa por:

$$\overline{C(z)} = \frac{1}{U} \int_A wC \, dA = \frac{\int_0^R C(r, z) 2\pi r w \, dr}{\pi R^2 \overline{U}} \quad (4.29)$$

Passando para coordenadas cilíndricas, e usando as relações já apresentadas anteriormente que, sendo $\tilde{Y} = \frac{r}{R}$, $\frac{w}{U} = 2(1 - \tilde{Y}^2)$ e que $dr = R d\tilde{Y}$ é possível reescrever a concentração média em termos das variáveis adimensionais, expressa por:

$$\overline{\tilde{C}(\tilde{Z})} = 4 \int_0^1 \tilde{C}(\tilde{Z}, \tilde{Y}) \tilde{Y} (1 - \tilde{Y}^2) d\tilde{Y} \quad (4.30)$$

Assim, substituindo solução geral em 4.30 é possível obter a relação expressa por:

$$\overline{\tilde{C}(\tilde{Z})} = 4 \sum_{n=0}^{\infty} A_n e^{(-\lambda_n^2 \tilde{Z})} \int_0^1 \beta_n(\tilde{Y}) \tilde{Y} (1 - \tilde{Y}^2) d\tilde{Y} \quad (4.31)$$

³Sendo que A é a área seção transversal.

Considera-se na equação 4.31, o termo da integral pode ser substituído pela expressão B.58, logo expressa por:

$$\overline{\tilde{C}(\tilde{Z})} = 4 \sum_{n=0}^{\infty} A_n e^{(-\lambda_n^2 \tilde{Z})} \frac{-1}{\lambda_n^2} \left(\frac{d\beta_n}{d\tilde{Y}} \right)_{\tilde{Y}=1} \quad (4.32)$$

onde β_n é substituído por Gz_n , Gz_n^* ou $Gz_n^\#$ de acordo com o método aplicado.

5 MODELAGEM NUMÉRICA

Na mecânica dos fluidos muitos problemas não possuem solução analítica e nesses casos o emprego de métodos numéricos para obtenção da solução é uma prática comum. Neste capítulo será descrita a solução da equação 4.10 utilizando o Método de Diferenças Finitas (MDF), mais especificamente o esquema de Crank-Nicolson.

Uma abordagem similar foi feita por [Ali e Omar \(2015\)](#), onde foi analisado o perfil de temperatura um tubo cilíndrico em fluxo laminar totalmente desenvolvido. Um esquema numérico foi desenvolvido pelos autores, para visualização do perfil de temperatura, cuja estratégia de cálculo é baseada no esquema de colocação ortogonal seguido pelo esquema de Crank-Nicolson. Os resultados apontados no estudo mostram uma consonância entre os dois esquemas, mas sendo o Crank-Nicolson melhor para casos de uma maior precisão. Por este fator, o presente estudo numérico com o MDF de Crank-Nicolson será adotado neste trabalho, e aqui será desenvolvido usando com base no código próprio apresentado no Apêndice C.

5.1 DISCRETIZAÇÃO COM O ESQUEMA DE CRANK NICOLSON

O MDF de Crank Nicolson é um esquema de segunda ordem no tempo e no espaço, implícito no tempo e é numericamente estável desenvolvido por John Crank e Phyllis Nicolson na metade do século XX ([Crank e Nicolson, 1947](#)). Tal esquema implícito alternativo busca chegar mais próximo do valor real das derivadas.

Para alcançar o objetivo aqui proposto, as aproximações são implementadas no ponto médio do incremento da direção axial já que se trata de uma equação em regime permanente, e aplicando uma malha estruturada, como pode ser ilustrado na Figura 5.1.

A equação 4.10 pode ser reescrita, usando-se a regra do produto para derivadas, e apresentada na forma de:

$$\frac{1}{\tilde{Y}} \frac{\partial \tilde{C}}{\partial \tilde{Y}} + \frac{\partial^2 \tilde{C}}{\partial \tilde{Y}^2} = (1 - \tilde{Y}^2) \frac{\partial \tilde{C}}{\partial \tilde{Z}} \quad (5.1)$$

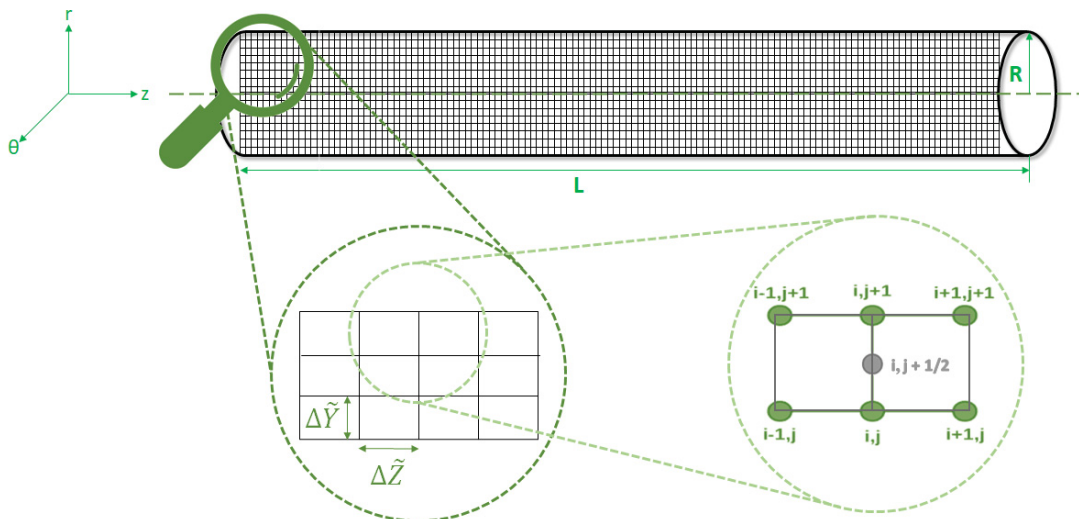


Figura 5.1: Discretização do tubo e o esquema de Crank Nicolson

Portanto, usa-se as seguintes discretizações para cada derivada aproximada, onde $h = \Delta\tilde{Y}$ é o incremento na direção radial e $k = \Delta\tilde{Z}$ é o incremento na direção axial. Sendo o tamanho da malha dados pelo produto do tamanho de nós em \tilde{Y} e \tilde{Z} , logo $\tilde{C}_{i,j} = (i\Delta\tilde{Y}, j\Delta\tilde{Z}) = (ih, jk)$.

$$\left. \frac{\partial^2 \tilde{C}}{\partial \tilde{Y}^2} \right|_{i,j+\frac{1}{2}} = \frac{1}{2} \left(\frac{\tilde{C}_{i+1,j+1} - 2\tilde{C}_{i,j+1} + \tilde{C}_{i-1,j+1}}{h^2} + \frac{\tilde{C}_{i+1,j} - 2\tilde{C}_{i,j} + \tilde{C}_{i-1,j}}{h^2} \right) \quad (5.2)$$

$$\left. \frac{1}{\tilde{Y}} \frac{\partial \tilde{C}}{\partial \tilde{Y}} \right|_{i,j+\frac{1}{2}} = \frac{1}{2\tilde{Y}_i} \left(\frac{\tilde{C}_{i+1,j+1} - \tilde{C}_{i-1,j+1}}{2h} + \frac{\tilde{C}_{i+1,j} - \tilde{C}_{i-1,j}}{2h} \right) \quad (5.3)$$

$$\left(1 - \tilde{Y}^2 \right) \left. \frac{\partial \tilde{C}}{\partial \tilde{Z}} \right|_{i,j+\frac{1}{2}} = \left(1 - \tilde{Y}_i^2 \right) \left(\frac{\tilde{C}_{i,j+1} - \tilde{C}_{i,j}}{2(\frac{k}{2})} \right) \quad (5.4)$$

As derivadas primeira e segunda de \tilde{C} em relação a \tilde{Y} são aproximadas por derivadas centrais com erros de truncamento da ordem de $O(\Delta\tilde{Y})$ e $O(\Delta\tilde{Y}^2)$ respectivamente, sendo discretizadas na forma de 5.2 e 5.3. Já a derivada em relação a \tilde{Z} é discretizada por derivada progressiva de $O(\Delta\tilde{Z})$, discretizada na forma de 5.4.

Substituindo as aproximações na equação e agrupando-se os termos a equação discretizada pode ser escrita conforme:

$$A_i \tilde{C}_{i+1,j+1} + B_i \tilde{C}_{i,j+1} + C_i \tilde{C}_{i-1,j+1} = D_i \quad (5.5)$$

sendo válida para $0 < i < H$ e $0 < j < K$, ou seja, para os nós internos. Dado que $i = 0$ e $i = H$ representam os nós da fronteira na direção radial e que $j = 0$ e $j = K$ são os nós da fronteira na direção axial. Os coeficientes da equação 5.7 são dados por:

$$\begin{aligned} A_i &= \left(\frac{1}{2h^2} + \frac{1}{4\tilde{Y}_i h} \right) \\ B_i &= - \left(\frac{1}{h^2} + \frac{(1-\tilde{Y}_i^2)}{k} \right) \\ C_i &= \left(\frac{1}{2h^2} - \frac{1}{4\tilde{Y}_i h} \right) \\ D_i &= \tilde{C}_{i+1,j} \left(-\frac{1}{2h^2} - \frac{1}{4\tilde{Y}_i h} \right) + \tilde{C}_{i,j} \left(\frac{1}{h^2} - \frac{(1-\tilde{Y}_i^2)}{k} \right) + \tilde{C}_{i-1,j} \left(-\frac{1}{2h^2} + \frac{1}{4\tilde{Y}_i h} \right) \end{aligned} \quad (5.6)$$

As condições de contorno discretizadas permitem completar a matriz para a obtenção da solução numérica. Na entrada tem-se que $\tilde{C}_{i,0} = 1$, na parede $\tilde{C}_{H,j} = 0$ e na linha central a $\left. \frac{\partial \tilde{C}}{\partial \tilde{Y}} \right|_0 = 0$ em $\tilde{Y}_0 = 0$. Logo as equações que contêm os nós de fronteira são dadas por:

$$A_0 \tilde{C}_{1,j+1} + B_0 \tilde{C}_{0,j+1} + C_0 \tilde{C}_{-1,j+1} = D_0 \quad (5.7)$$

$$A_{H-1} \tilde{C}_{H,j+1} + B_{H-1} \tilde{C}_{H-1,j+1} + C_{H-1} \tilde{C}_{H-2,j+1} = D_{H-1}^1 \quad (5.8)$$

¹Esta equação foi escrita, por conveniência, com o nó imediatamente antecessor ao nó da fronteira ($H - 1$).

Aplicando a condição da na linha central em 5.7 e usando as relações:

$$\left. \frac{\partial \tilde{C}}{\partial \tilde{Y}} \right|_{i,j+1} = \frac{\tilde{C}_{i+1,j+1} - \tilde{C}_{i-1,j+1}}{2h} = 0 \quad \text{e} \quad \left. \frac{\partial \tilde{C}}{\partial \tilde{Y}} \right|_{i,j} = \frac{\tilde{C}_{i+1,j} - \tilde{C}_{i-1,j}}{2h} = 0 \quad (5.9)$$

Tem-se assim que $\tilde{C}_{-1,j} = \tilde{C}_{1,j}$ e $\tilde{C}_{-1,j+1} = \tilde{C}_{1,j+1}$. Aplicando estas relações, a equação 5.7 pode ser reescrita como:

$$(A_0 + C_0)\tilde{C}_{1,j+1} + B_0\tilde{C}_{0,j+1} = D_1 \quad (5.10)$$

onde:

$$\begin{aligned} A_0 + C_0 &= \left(\frac{1}{h^2} \right) \\ B_0 &= - \left(\frac{1}{h^2} + \frac{(1-\tilde{Y}_0^2)}{k} \right) \\ D_0 &= \tilde{C}_{1,j} \left(-\frac{1}{h^2} \right) + \tilde{C}_{0,j} \left(\frac{1}{h^2} - \frac{(1-\tilde{Y}_0^2)}{k} \right) \end{aligned} \quad (5.11)$$

Usando a condição na parede a equação 5.8 pode ser reescrita como:

$$B_{H-1}\tilde{C}_{H-1,j+1} + C_{H-1}\tilde{C}_{H-2,j+1} = D_H \quad (5.12)$$

onde:

$$\begin{aligned} B_{H-1} &= \left(-\frac{1}{h^2} - \frac{(1-\tilde{Y}_{H-1}^2)}{k} \right) \\ C_{H-1} &= \left(\frac{1}{2h^2} - \frac{1}{4\tilde{Y}_{H-1}h} \right) \\ D_{H-1} &= \tilde{C}_{H-1,j} \left(\frac{1}{h^2} - \frac{(1-\tilde{Y}_{H-1}^2)}{k} \right) + \tilde{C}_{H-2,j} \left(-\frac{1}{2h^2} + \frac{1}{4\tilde{Y}_{H-1}h} \right) \end{aligned} \quad (5.13)$$

Agora usando a condição na entrada é possível montar a matriz tridiagonal, como descrito na seção seguinte, que fornece a solução do problema. A discussão dos resultados apresentados pela solução numérica será apresentada no capítulo 6.

5.2 MÉTODO DA MATRIZ TRIDIAGONAL

O método da matriz tridiagonal, TDMA ou ainda algoritmo de Thomas é o caso particular da eliminação gaussiana aplicada em uma matriz que seja tridiagonal proposto por Thomas (1949).

$$\begin{bmatrix} b_1 & c_1 & & & \\ a_2 & b_2 & c_2 & & \\ & a_3 & b_3 & \ddots & \\ & & \ddots & \ddots & c_{n-1} \\ & & & a_n & b_n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} d_1 \\ d_2 \\ d_3 \\ \vdots \\ d_n \end{bmatrix} \quad (5.14)$$

Na matriz do sistema 5.14 não é necessário armazenar todos os elementos da matriz em memória, sendo suficiente armazenar os vetores a_n , b_n e c_n . E por conveniência, a partir daqui, defini-se os elementos inexistentes na matriz como zero, ou seja, $a_1 = c_n = 0$. Assim

o algoritmo para a solução do sistema tridiagonal 5.14 pelo algoritmo TDMA é dado pelas seguintes expressões:

$$\begin{aligned} c'_i &= \begin{cases} \frac{c_i}{b_i}, & i = 1 \\ \frac{c_i}{b_i - a_i c'_{i-1}}, & i = 2, 3, \dots, n-1 \end{cases} \\ d'_i &= \begin{cases} \frac{d_i}{b_i}, & i = 1 \\ \frac{d_i - a_i d'_{i-1}}{b_i - a_i c'_{i-1}}, & i = 2, 3, \dots, n \end{cases} \end{aligned} \quad (5.15)$$

Assim a solução final é obtida por substituição reversa, dada por:

$$\begin{aligned} x_n &= d'_n \\ x_i &= d'_i - c'_i x_{i+1}, \quad i = n-1, n-2, \dots, 1 \end{aligned} \quad (5.16)$$

sendo obtidas pela aplicação da eliminação gaussiana sem pivotamento ao sistema 5.14. Deste modo usando estas método é possível aplicar a função (TDMA(a,b,c,d)) aplicada no código para solução numérica apresentado no apêndice C.2 para se resolver a matriz tridiagonal resultante da discretização numérica.

6 RESULTADOS E DISCUSSÕES

6.1 RESULTADOS DA SOLUÇÃO ANALÍTICA

Os resultados e discussões apresentados nesta seção concentram-se em analisar os perfis de concentração no tubo e a taxa de deposição na parede, baseando-se nas soluções dadas pelas equações 4.17, 4.21 ou 4.26 obtidas em cada rota analítica adotada. Além disso, a eficiência da amostragem isocinética, baseando-se nas mesmas equações, foi verificada para observar se seu comportamento é similar ao apresentado por Tyree e Allen (2004).

Como visto no capítulo 4, as três soluções em série do problema dependem da função de Graetz, que foi obtida de três formas: i) aplicação direta do método de Frobenius, ii) por uma mudança de variável chegando na função de Whittaker e iii) por uma nova abordagem com outra mudança de variável e a aplicação de funções hipergeométricas confluentes. A seguir são mostrados como foram obtidos os autovalores λ_n , as autofunções e respectivas constantes A_n para cada uma das três soluções em série investigadas. Assim, é possível verificar o que é apresentado na literatura e analisar as especificidades e limitações da aplicação de cada aproximação. Busca-se complementar a discussão com a ampliação no número de autovalores utilizados, bem como, com testes realizados com a nova proposição de solução (conforme proposto na seção 4.1.4). Nos artigos de Brown (1960); Tyree e Allen (2004), por exemplo, os autores apresentam uma tabela de autovalores e constantes utilizados na análise por eles proposta. Entretanto, não foi encontrada uma discussão sobre as diferenças nos autovalores calculados por cada autofunção das equações 4.17, 4.21 ou 4.26 do ponto de vista do estudo do problema de Graetz estendido.

Para iniciar a comparação entre as três soluções, o primeiro passo é a obtenção dos autovalores aplicáveis. Em seu trabalho Graetz (1882) foi capaz de calcular os dois primeiros autovalores para a série. Já Brown (1960) obteve em um computador os primeiros 11 autovalores apresentando-os com 10 casas decimais, além de fazer também referências a valores obtidos por outros autores como, por exemplo, os obtidos por Sellars et al. (1954). A obtenção destes autovalores, bem como as autofunções associadas e as respectivas constantes da solução geral não era uma tarefa simples, dado as limitações de processamento antes da década de 60. Nesse sentido, como a ideia aqui proposta é investigar detalhes das três séries, foram utilizados códigos próprios (Apêndice C) para determinação dos autovalores, autofunções e constantes a serem explorados dentro da proposta de estudo aqui apresentada.

Cabe-se salientar que uma das justificativas para essa verificação, foi para testar uma divergência encontrada na literatura. Rice e Do (1994) afirmam que a autofunção aplicada à solução do problema converge muito lentamente, portanto, um grande número de termos deve ser mantido. Já Ghiaasiaan (2011) aponta que a mesma série converge rapidamente e, para todos os efeitos práticos, cerca de 10 termos na série são suficientes. Uma análise preliminar para essa diferença de argumentação entre os autores, é que ela pode se justificar pelas diferentes quantidades de autovalores que cada autor usa de acordo com seu objetivo de análise, ou pela série empregada na solução. Logo, este texto discute inicialmente esta questão antes de se partir para as aproximações da taxa de deposição propriamente dita.

6.1.1 Análise dos autovalores e constantes associadas

Na análise da revisão bibliográfica verifica-se que Rice e Do (1994) aplicaram a solução usando Frobenius e Ghiaasiaan (2011); Bowen et al. (1976) aplicaram a teoria das funções hipergeométricas. Uma conclusão trivial é que pode haver diferenças nos resultados, do ponto de

vista da solução geral dado ao comportamento da série, mas que não há muitos desdobramentos discutidos entre tais caminhos descritos na literatura.

Nota-se na literatura revisada, que os resultados para os os autovalores começaram a divergir a partir do sexto autovalor. Essa observação levou a necessidade de testar os autovalores, e como visto a seguir, conclui-se que [Brown \(1960\)](#); [Ghiaasiaan \(2011\)](#), dentre outros, geralmente propagam o cálculo dos autovalores obtido pela equação proposta por [Sellars et al. \(1954\)](#) com base no padrão assintótico das funções hipergeométricas confluentes, e que como será mostrado, é diferente da aplicação direta o método de Frobenius. Essa verificação leva à discussão aqui apresentada e que traz um novo caminho de análise até então não encontrado na literatura, apesar de ser um problema amplamente discutido.

Padronizou-se nas análises aqui apresentadas o uso de cinco casas decimais, e em alguns casos específicos apresentados com mais casas decimais, quando apenas 5 não foram significativas (principalmente nas constantes A_n na solução por Frobenius). Os testes usando as funções obtidas após mudança de variável ou método de Frobenius têm aumento progressivo no tempo de simulação computacional ao se empregar muitas muitas casas decimais devido à quantidade de iterações. Entretanto, testes ampliando o número de casas não mostraram-se relevantes, sendo que o que realmente faz com que a solução encontrada tenha variação de forma mais significativa é o número de autovalores empregados nas séries.

Como discutido por [Brown \(1960\)](#); [Bowen et al. \(1976\)](#) e outros autores da revisão de literatura, sabe-se que o problema de estudo leva à um problema de Sturm-Liouville no qual os autovalores são as raízes da autofunção associada aplicando-se a condição de contorno. No caso de estudo analisado, a solução da equação para obter os autovalores requer uma solução por aproximação numérica, aqui obtida de forma iterativa, aplicando-se a condição de contorno na parede para cada solução.

Neste caso, os autovalores foram calculados para atender a condição de contorno na parede ($G_{z_n}(1, \lambda_n) = 0$, $G_{z_n}^*(1, \lambda_n) = 0$ ou $G_{z_n}^\#(1, \lambda_n) = 0$) para todas as aproximações. Foram testados iterativamente 3.000.000 candidatos a autovalores na série (usando a condição de fronteira). Neste caso, foi aplicado a cada grupo unitário (0 até 1; 1 até 2, ..., 299 até 300) testes com passo de iteração de 0,00001 e no fim de cada grupo retornou-se o λ_n que apresentou o menor valor para a série em $\tilde{Y} = 1$, com condição de precisão os valores menores que 10^{-5} . Salienta-se, que foi utilizada a função *mpmath.hyp1f1* da linguagem *Python* para a determinação dos autovalores (função essa que retorna o resultado quando a convergência da série é atendida), sendo que nestes casos foram retornados um subgrupo de $n = 300$ candidatos a autovalores aplicando a teoria da funções hipergeométricas.

Para a solução utilizando a aplicação direta do método de Frobenius empregou-se o mesmo princípio iterativo. Inicialmente, definiu-se o número de termos necessários na série G_{z_n} para que a convergência seja atendida, dado que não existe uma função específica para esta série (como a função *mpmath.hyp1f1*). Testou-se um número "k" de termos (10, 50, 100 e 200), e verificou-se 200 termos na série G_{z_n} são mais que suficientes para convergência da série.

Uma vez definido o tamanho da série, o passo iterativo foi aplicado a cada grupo unitário, mas verificou-se que a solução começou a extrapolar a condição de contorno, a partir de $n > 45$. Portanto definiu-se que número de autovalores foi reduzido para $n = 45$ com a aplicação direta do método de Frobenius. A divergência na solução está associada ao não atendimento da condição de contorno na parede. Ou seja, a condição na parede, que deveria ser nula começa aumentar exponencialmente (o que foi conferido continuando-se até $n = 100$). O que permite concluir previamente que há uma limitação do número de autofunções e autovalores quando aplica-se o diretamente método de Frobenius na solução do problema.

Na Tabela 6.1 são apresentados os 75 autovalores e respectivas constantes para as soluções obtidas usando $Gz_n^*(1)$ ou $Gz_n^\#(1)$. Salienta-se ainda que os autovalores testados foram os mesmos por ambas as séries, o que mostra que ambas as soluções, além de apresentarem semelhança na equação geral da própria série, tem aplicabilidade ao problema, e possuem padrão assintótico igual.

Na Tabela 6.2 apresenta-se as soluções dos autovalores que atendem a precisão aqui estabelecida (menores que 10^{-5}), para $Gz_n(1, \lambda_n) = 0$, e suas respectivas constantes, bem como, um subgrupo dos primeiros n autovalores e constantes da Tabela 6.1 para comparação.

Tabela 6.1: Autovalores (λ_n) e constantes (A_n) do Problema de Graetz estendido obtidos aplicando as funções hipergeométricas (Gz_n^* e $Gz_n^\#$)

n	λ_n	A_n	n	λ_n	A_n	n	λ_n	A_n
0	2,70436	1,47644	25	102,66700	-0,12984	50	202,66680	0,0825
1	6,67903	-0,80612	26	106,66698	0,12657	51	206,66680	-0,08144
2	10,67338	0,58876	27	110,66697	-0,12351	52	210,66679	0,0804
3	14,67108	-0,47585	28	114,66695	0,12062	53	214,66679	-0,0794
4	18,66987	0,40502	29	118,66694	-0,11789	54	218,66679	0,07843
5	22,66914	-0,35576	30	122,66693	0,11531	55	222,66678	-0,07749
6	26,66866	0,31917	31	126,66692	-0,11287	56	226,66678	0,07657
7	30,66832	-0,29074	32	130,66691	0,11055	57	230,66678	-0,07568
8	34,66807	0,26789	33	134,66690	-0,10835	58	234,66678	0,07482
9	38,66788	-0,24906	34	138,66689	0,10626	59	238,66677	-0,07398
10	42,66773	0,23323	35	142,66688	-0,10426	60	242,66677	0,07317
11	46,66761	-0,21969	36	146,66687	0,10236	61	246,66677	-0,07237
12	50,66752	0,20796	37	150,66687	-0,10054	62	250,66677	0,0716
13	54,66743	-0,19768	38	154,66686	0,09880	63	254,66677	-0,07085
14	58,66736	0,18859	39	158,66685	-0,09713	64	258,66676	0,07012
15	62,66731	-0,18047	40	162,66685	0,09553	65	262,66676	-0,0694
16	66,66726	0,17317	41	166,66684	-0,09400	66	266,66676	0,06871
17	70,66721	-0,16657	42	170,66683	0,09252	67	270,66676	-0,06803
18	74,66717	0,16057	43	174,66683	-0,09110	68	274,66676	0,06737
19	78,66714	-0,15507	44	178,66682	0,08974	69	278,66675	-0,06672
20	82,66711	0,15003	45	182,66682	-0,08842	70	282,66675	0,06609
21	86,66708	-0,14537	46	186,66682	0,08715	71	286,66675	-0,06547
22	90,66706	0,14106	47	190,66681	-0,08593	72	290,66675	0,06487
23	94,66704	-0,13706	48	194,66681	0,08475	73	294,66675	-0,06428
24	98,66702	0,13333	49	198,66680	-0,08361	74	298,66675	0,06371

Nesse sentido, a Figura 6.1 ilustra graficamente os valores das autofunções de cada intervalo unitário calculados com o emprego das aproximações por funções hipergeométricas (Figura 6.1(a)) e com o método de Frobenius (Figura 6.1(b)), sendo plotados os 300 candidatos a autovalores com o emprego das funções hipergeométricas e 45 candidatos a autovalores com o emprego do método de Frobenius.

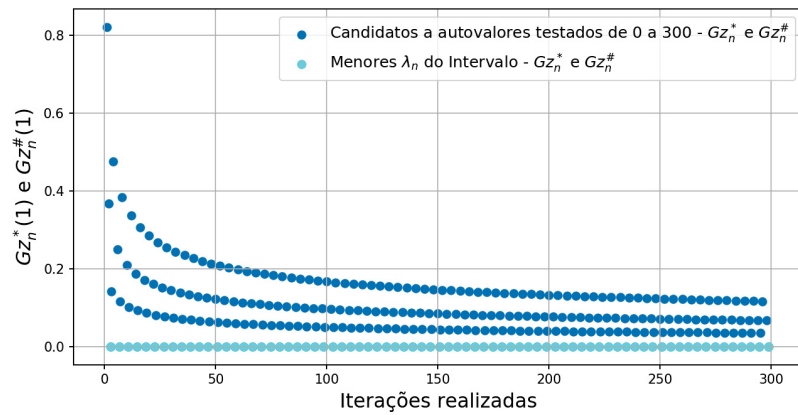
Na Figura 6.1(a) é possível observar o comportamento assintótico das autofunções em ambas as funções hipergeométricas, o que é esperado pela teoria que envolve tal grupo de funções dado as suas propriedades de convergência superiores, além de se verificar que os autovalores são os mesmos para Gz_n^* e $Gz_n^\#$. Sendo os menores valores de λ_n do intervalo destacados na figura são os que estão apresentados na Tabela 6.1, com o emprego das funções hipergeométricas.

Já para os autovalores obtidos por Frobenius esse comportamento assintótico não é identificado claramente (Figura 6.1(b)), e quando $n > 30$, esse padrão não continua. Sendo que, quando $n > 45$ no método de Frobenius os autovalores retornados geram autofunções que não atendem a condição de contorno na parede, ou seja, $Gz_n^*(1, \lambda_n) \gg 0$ (o que não pode ocorrer por

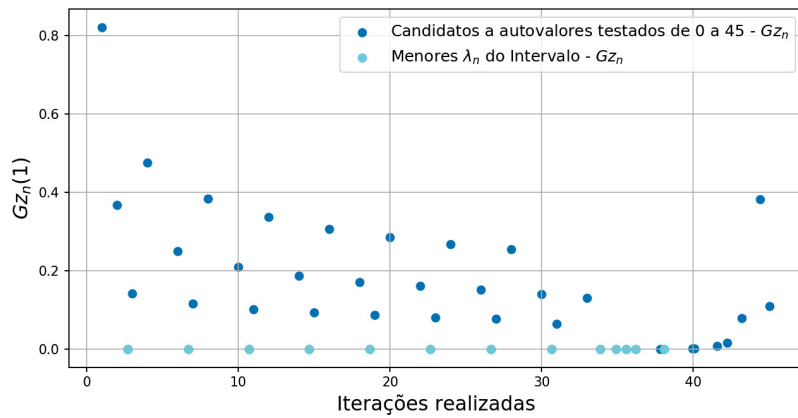
Tabela 6.2: Autovalores (λ_n) e constantes (A_n) do Problema de Graetz estendido obtidos aplicando o método de Frobenius (Gz_n) e os primeiros das funções hipergeométricas (Gz_n^* e $Gz_n^\#$)

n	Valores Obtidos por Gz_n		Valores Obtidos por Gz_n^* e $Gz_n^\#$	
	λ_n	A_n	λ_n	A_n
0	2,70436	1,47644	2,70436	1,47644
1	6,67903	-0,80612	6,67903	-0,80612
2	10,67338	0,58876	10,67338	0,58876
3	14,67108	-0,47585	14,67108	-0,47585
4	18,66987	0,40406	18,66987	0,40502
5	22,66914	-0,43328	22,66914	-0,35576
6	26,66861	0,04908	26,66866	0,31917
7	30,65024	-0,00097	30,66832	-0,29074
8	33,86762	-0,00001140	34,66807	0,26789
9	34,89651	0,00000219	38,66788	-0,24906
10	35,57282	0,00000058	42,66773	0,23323
11	36,20482	0,00000039	46,66761	-0,21969
12	38,09350	0,00000004	50,66752	0,20796

princípio). Sendo que os menores valores de λ_n do intervalo destacados na figura são os que estão apresentados na Tabela 6.2, com o emprego do Método de Frobenius de forma direta.



(a) Autofunções de cada interação no intervalo de 0 a 300 com funções hipergeométricas.



(b) Autofunções de cada laço no intervalo de 0 a 45 com Frobenius.

Figura 6.1: Autofunções obtidas pelo laço iterativo aplicando a condição de contorno na parede.

Como visto na literatura, tal padrão assintótico para o grupo das funções hipergeométricas, para os autovalores destacados tem o comportamento similar ao apresentado por [Sellars et al. \(1954\)](#). O autor observou a similaridade dos termos de modo que os valores λ_n podem ser obtidos pela expressão $\lambda_n = 4n + (8/3)$ válida para $n = 0, 1, 2, 3, \dots$ ([Sellars et al., 1954](#)), o que foi conferido fazendo a regressão linear para os 75 λ_n , como pode ser visto na Figura 6.2.

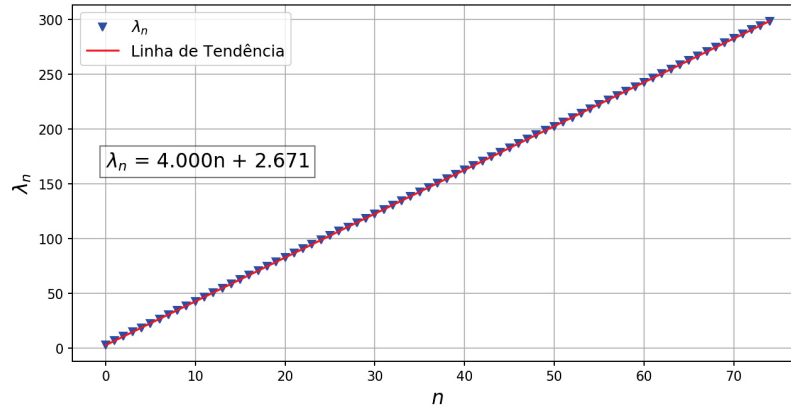


Figura 6.2: Regressão linear para os 75 λ_n (Tabela 6.2)

Valores similares aos da Tabela 6.1 foram apresentados por [Tyree e Allen \(2004\)](#), que em seu estudo apresentou 50 autovalores e suas respectivas constantes. Para melhorar a precisão dos resultados, optou-se aqui por apresentar todos os λ_n para uma precisão de cinco casas decimais, como o uso do teste iterativo. Optou-se também por expandir a quantidade de autovalores, sendo que este aumento foi de mais 25 autovalores em relação ao apresentado por [Tyree e Allen \(2004\)](#), ou seja, um acréscimo de 50% no número de autovalores aplicáveis a soluções obtidas pela teoria das funções hipergeométricas (total de 75 autovalores).

Nota-se também que [Bhatti e Shah \(1987\)](#); [Ghiaasiaan \(2011\)](#); [Brown \(1960\)](#) apresentaram os mesmos primeiros autovalores da Tabela 6.2 baseados nas séries hipergeométricas, mas que os mesmos não apresentam análises e discussões com o emprego efetivo de muitos autovalores como aqui apresentado, nem em relação a diferença aqui identificada entre as soluções no que tange os a quais autovalores são aplicáveis a cada solução. Essa observação justifica-se levando em consideração que a maioria dos autores apresentam em suas discussões o emprego de no máximo seis autovalores, e como pode ser visto na tabela, são os mesmos independente do método empregado.

Tem-se também que nas Tabelas 6.1 e 6.2, como mencionado, são apresentado os valores das constantes A_n , e que só dependem do valor de λ_n e são obtidos pela equação definida na seção 4.1.5, sendo que os valores das constantes A_n são obtidos por aproximação de diferença finita centrada na equação 4.28 no termo de sua derivada.

Na Figura 6.3 é possível verificar os valores das constantes com o emprego da função Gz_n^* e $Gz_n^\#$ (Figura 6.3(a)) e com o método de Frobenius (Figura 6.3(b)), nelas é possível identificar uma convergência dos valores de A_n . Essa convergência é explicada pela própria teoria de ortogonalidade de Sturm-Liouville. Uma consideração interessante neste sentido é que o somatório dos valores de $A_n \rightarrow 1$ a medida de n cresce, como comenta [Tyree e Allen \(2004\)](#).

Com base na observação da convergência do somatório das constantes apresentada por [Tyree e Allen \(2004\)](#), tem-se que, para a solução que aplica Gz_n^* e $Gz_n^\#$ com 50 autovalores a soma das constantes é 0,958 e com 75 autovalores a soma das constantes é 1,031. Além disso, ao se olhar para um número diferente de constantes é possível estabelecer a mesma premissa de somar os valores de A_n . Com base na Tabela. 6.2 em ambos os métodos, tem-se que a solução

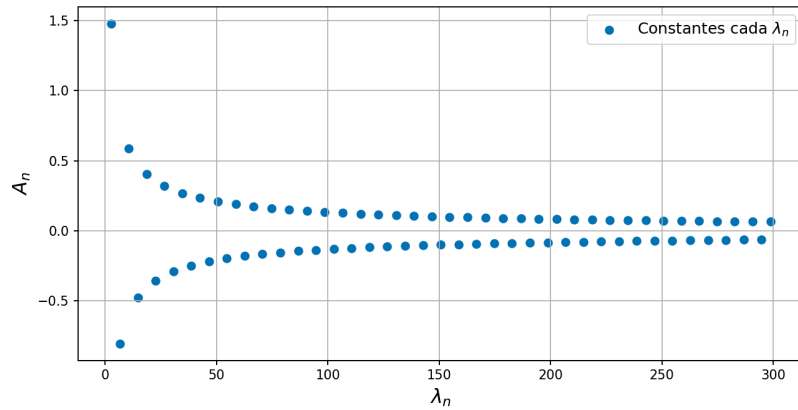
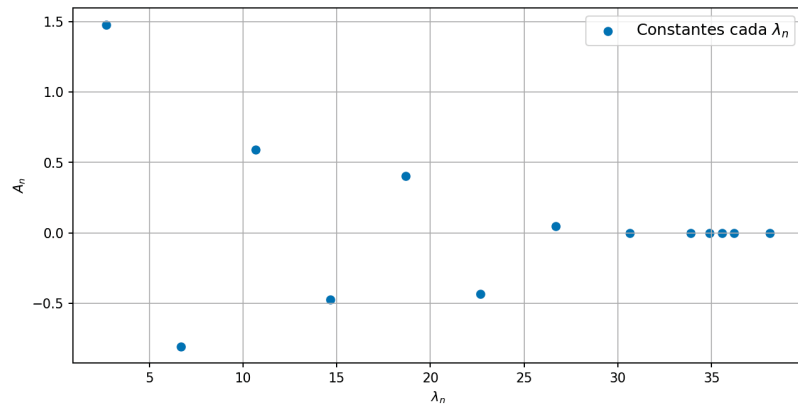
(a) Constantes obtidas por Gz_n^* e $Gz_n^\#$ (Tabela.6.1)(b) Constantes obtidas por Gz_n (Tabela. 6.2)

Figura 6.3: Constantes para cada autovalor

com 10 autovalores apresenta a soma de suas constantes igual a 0,880 para Gz_n^* e $Gz_n^\#$, e a soma é 0,802 aplicando Frobenius, uma diferença de 8,9% de redução em relação as aproximações por funções hipergeométricas. Já para a solução com o emprego de 6 autovalores a soma das constantes próprias é 0,832 aplicando Gz_n^* e de 0,754 aplicando Frobenius, uma diferença de 9,7% de redução em relação as soluções hipergeométricas.

Além disso, a análise das séries para os seis primeiros autovalores permite perceber que os métodos divergem próximo à região de sobreposição das condições de fronteira, fenômeno este semelhante ao fenômeno de Gibbs. Tem-se também, que mesmo o método de Frobenius possuindo uma limitação do número de autovalores em relação a Gz_n^* e $Gz_n^\#$, essa limitação não invalida sua aplicação.

Em suma, o que é encontrado na literatura e o que foi verificado até aqui é que os autovalores são iguais até o sexto autovalor ($n = 5$). Em casos com mais autovalores a solução geral deve ter o respectivo autovalor empregado de acordo com a série que foi utilizada. A partir daqui uma vez identificados e verificados os autovalores, autofunções e constantes aplicáveis a cada método, serão analisados os perfis de concentração e a deposição de MP estimada, como proposto.

6.1.2 Análises dos perfis de concentração com diferentes número de termos e diferentes soluções

Uma vez definidos os valores de λ_n e A_n , é possível estabelecer as soluções para os perfis de concentração ao longo do escoamento. Para tal análise agrupa-se os resultados para

$\tilde{Z} \leq 0,005$ e $\tilde{Z} \geq 0,005$, bem como, com o emprego de diferentes números de λ_n , sendo aqui inicialmente comparados os perfis empregando-se 6, 50 e 75 autovalores.

A escolha deste números de autovalores empregados é para se comparar a soluções hipergeométricas com a solução obtida pelo método de Frobenius. Os 6 primeiros autovalores λ_n são iguais independente do método de solução. Entretanto, quando foram utilizados 50 e 75 autovalores é possível observar a diferença dos resultados obtidos pelas soluções das séries baseadas nas funções hipergeométricas a medida que se expande a quantidade de autovalores empregados.

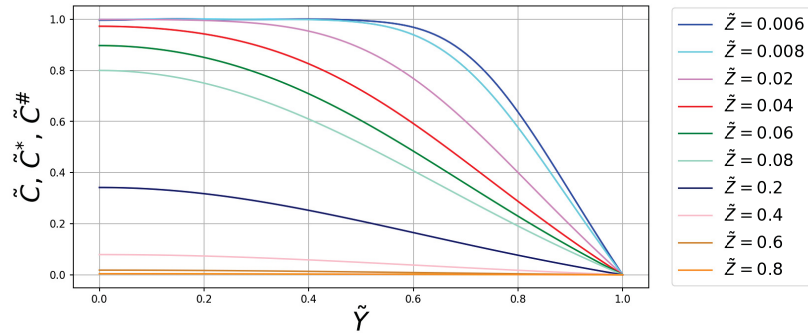


Figura 6.4: Perfis de concentração $\tilde{Z} \geq 0,005$ e 6, 50 e 75 autovalores - Para \tilde{C} , \tilde{C}^* ou $\tilde{C}^\#$

Nas Figura 6.4 é possível identificar que os perfis de concentração para $\tilde{Z} \geq 0,005$ visualmente não apresentam diferenças, independentemente do série empregada, bem como, independente do número de autovalores. Já ao se comparar os a diferença entre os perfis, tem-se que as Figuras 6.5 e 6.6 mostram que há um desvio mínimo entre os perfis. Sendo que, comparando as soluções obtidas com o uso das funções hipergeométricas a diferença entre os perfis se torna mais distribuída ao longo da direção radial (Figura 6.6), o que mostra uma consonância entre as soluções, como era-se esperado. Já ao se comparar as soluções obtidas com o uso das funções hipergeométricas com o o uso do método de Frobenius, é possível verificar que as diferenças se concentram na região próximo a parede (Figura 6.5), fenômeno este semelhante ao fenômeno de Gibbs.

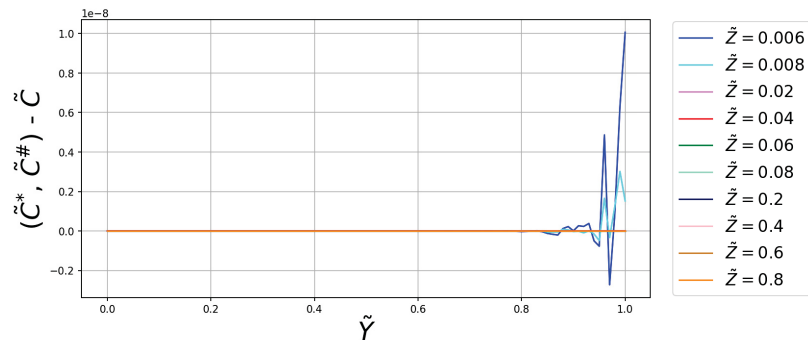


Figura 6.5: Diferenças dos perfis de concentração para $\tilde{Z} \geq 0,005$ e com uso de 6 autovalores - Comparativo entre $(\tilde{C}^* \text{ ou } \tilde{C}^\#)$ com \tilde{C}

Uma observação importante é que os valores obtidos pela nova solução são um pouco menores do que os obtidos pela função de Whittaker. Isso pode significar, como será avaliado mais a frente, uma diminuição da superestimação que a aproximação assintótica propaga para a taxa de deposição.

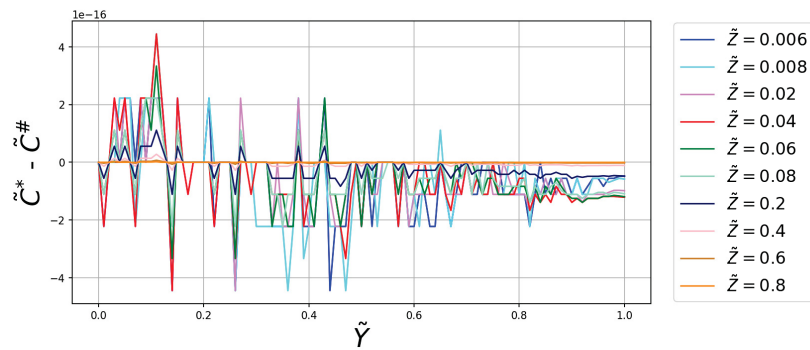


Figura 6.6: Diferenças dos perfis de concentração para $\tilde{Z} \geq 0,005$ e com uso de 50 e 75 autovalores - Comparativo entre \tilde{C}^* e $\tilde{C}^\#$

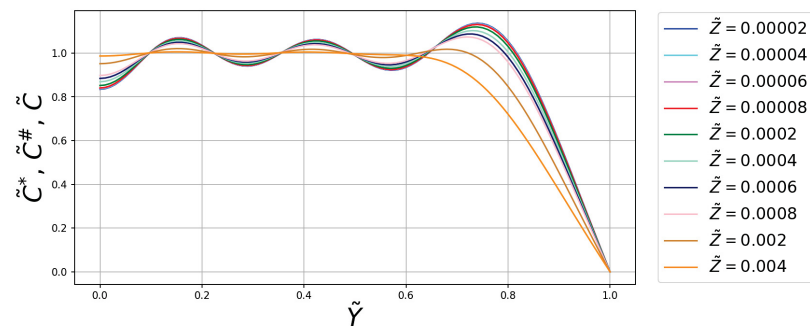


Figura 6.7: Diferenças dos perfis de concentração para $\tilde{Z} \leq 0,005$ e com uso de 6 autovalores - Para \tilde{C} , \tilde{C}^* ou $\tilde{C}^\#$

Na Figura 6.7 é possível identificar que os perfis de concentração para $\tilde{Z} \leq 0,005$ visualmente não apresentam diferenças, independentemente do série empregada, bem como, independente do número de autovalores, mas que apresenta oscilações como era esperado pela teoria. Estas oscilações levaram ao desenvolvimento da solução de Lévêque, que é aplicada para otimizar as soluções em regiões muito próximas à entrada.

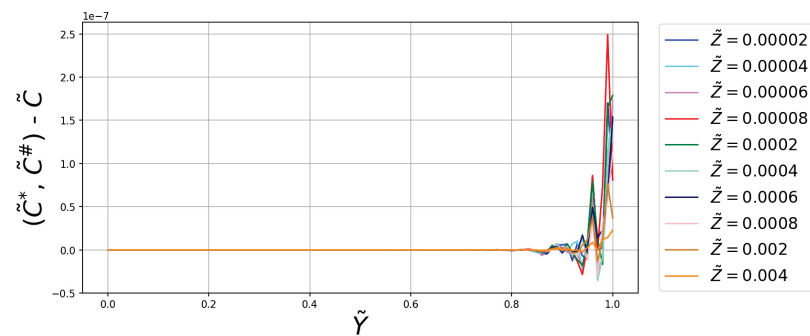


Figura 6.8: Diferenças dos perfis de concentração para $\tilde{Z} \leq 0,005$ e com uso 6 autovalores - Comparativo entre $(\tilde{C}^*$ ou $\tilde{C}^\#)$ com \tilde{C}

Já ao se comparar os a diferença entre os perfis, tem-se que as Figuras 6.8 e 6.9 mostram que há um desvio mínimo entre os perfis. Sendo que a justificativa para tais diferenças são as mesmas, em relação a sua distribuição, para os perfis de concentração, $\tilde{Z} \geq 0,005$.

Um destaque é que os perfis de concentração para $\tilde{Z} \leq 0,005$ apresentam redução das oscilações mesmo em baixos valores de \tilde{Z} (Figuras 6.10 e 6.11), a medida que se aumenta o número de autovalores, com o emprego das soluções obtidas com o uso das funções hipergeométricas.

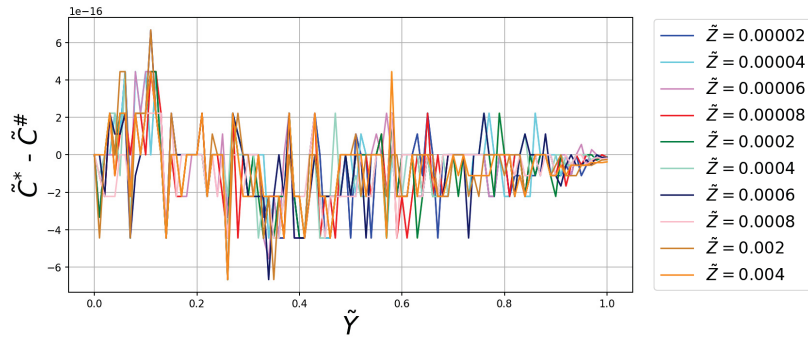


Figura 6.9: Diferenças dos perfis de concentração para $\tilde{Z} \leq 0,005$ e com uso de 50 ou 75 autovalores - Comparativo entre \tilde{C}^* e $\tilde{C}^\#$

Essa redução das oscilações permite indicar que o uso de mais autovalores mostra uma melhoria da acurácia da solução geral com o aumento para 75 autovalores, principalmente na região de entrada (baixos valores de \tilde{Z}) e na região de sobreposição das condições de fronteira.

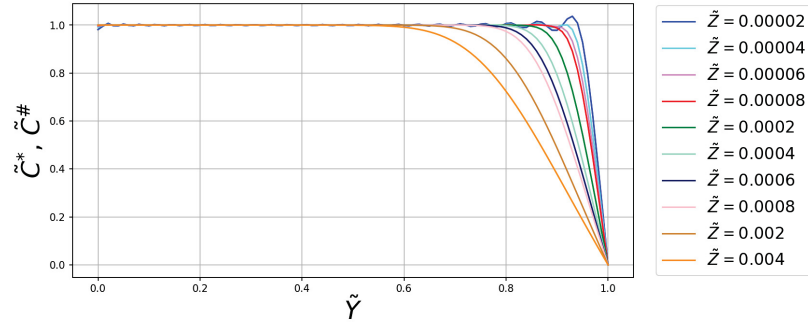


Figura 6.10: Perfis de concentração $\tilde{Z} \leq 0,005$ e 50 autovalores

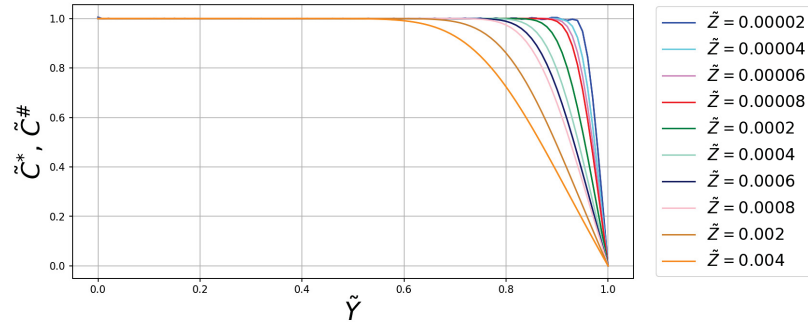


Figura 6.11: Perfis de concentração $\tilde{Z} \leq 0,005$ e 75 autovalores

Para se comparar os perfis de concentração, é empregado também duas métricas de erro: o MAE - *Mean Absolute Error* (Erro Absoluto Médio), que representa o desvio médio entre observado e predito; e o RMSE - *Root Mean Square Error* (Raiz do Erro Quadrático Médio), que é uma medida do desvio médio entre observado e predito. Comparando o RMSE e o MAE, o primeiro dá um peso maior para desvios grandes (pois são elevados ao quadrado), enquanto o MAE dá um peso igual a todos os desvios (Wilks, 2006).

$$\text{MAE} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N |O_i - P_i| \quad (6.1)$$

$$\text{RMSE} = \left[\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (O_i - P_i)^2 \right]^{1/2} \quad (6.2)$$

Nas equações 6.1 e 6.2, O_i representa i -ésimo valor observado e P_i representa i -ésimo valor predito em um conjunto com N pontos da grade ($N = n^\circ$ pontos axiais \times n° pontos radiais).

De maneira geral, pode-se dizer que ao se comparar os perfis apresentados até aqui com os valores das métricas aplicadas na análise quantitativa pode-se concluir o que já se havia observado. Ou seja, olhando para o RMSE, por exemplo (nas tabelas 6.3 e 6.4), os erros para o emprego de 6 autovalores aplicando ambas as soluções baseadas em séries hipergeométricas em relação à aplacação direta do método de Frobenius é o mesmo. Já ao se comparar a nova proposição com a solução obtida por Whittaker é possível verificar que a ordem do erro é a mesma para os diferentes números de autovalores, tanto para $\tilde{Z} \geq 0,005$ quanto para $\tilde{Z} \leq 0,005$. Sendo assim, analisando as métricas de erro em conjunto com a análise gráfica é possível dizer que dado a redução de oscilações, tem-se que o uso de 75 autovalores melhora a convergência da solução principalmente para $\tilde{Z} \leq 0,005$.

Tabela 6.3: MAE e RMSE dos perfis de concentração $\tilde{Z} \geq 0,005$

MAE	6 autovalores	50 autovalores	75 autovalores
Whittaker \times Frobenius	$2,18789 \times 10^{-10}$	—	—
Nova Proposição \times Frobenius	$2,18789 \times 10^{-10}$	—	—
Whittaker \times Nova Proposição	$3,81174 \times 10^{-16}$	$3,17645 \times 10^{-15}$	$4,76467 \times 10^{-15}$
RMSE	6 autovalores	50 autovalores	75 autovalores
Whittaker \times Frobenius	$1,0625 \times 10^{-09}$	—	—
Nova Proposição \times Frobenius	$1,0625 \times 10^{-09}$	—	—
Whittaker \times Nova Proposição	$2,62726 \times 10^{-16}$	$7,58426 \times 10^{-16}$	$9,28878 \times 10^{-16}$

Tabela 6.4: MAE e RMSE dos perfis de concentração $\tilde{Z} \leq 0,005$

MAE	6 autovalores	50 autovalores	75 autovalores
Whittaker \times Frobenius	$2,20909 \times 10^{-08}$	—	—
Nova Proposição \times Frobenius	$2,20909 \times 10^{-08}$	—	—
Whittaker \times Nova Proposição	$7,73801 \times 10^{-16}$	$7,03402 \times 10^{-15}$	$1,05668 \times 10^{-14}$
RMSE	6 autovalores	50 autovalores	75 autovalores
Whittaker \times Frobenius	$4,76118 \times 10^{-09}$	—	—
Nova Proposição \times Frobenius	$4,76118 \times 10^{-09}$	—	—
Whittaker \times Nova Proposição	$4,85139 \times 10^{-16}$	$1,51156 \times 10^{-15}$	$1,84965 \times 10^{-15}$

Olhando-se agora para as duas soluções obtidas pelas séries hipergeométricas e verificando a diferença dos perfis com a mesma solução mas variando o número de autovalores, tem-se que comparando o uso de 75 ou 50 autovalores com 6 autovalores a diferença foi mais significativa nos perfis próximos à entrada ($\tilde{Z} \leq 0,005$) e mais elevadas próximo à região de sobreposição das condições de fronteira (Figura 6.13). Para $\tilde{Z} \geq 0,005$, representados pelas

Figura 6.12 não foram encontradas grandes diferenças, sendo ainda visualizadas para valores ainda baixos de \tilde{Z} .

Comparando-se o uso de 75 e 50 autovalores para as soluções assintóticas foi identificado que há diferença apenas para $\tilde{Z} \leq 0,005$ (Figura 6.14) e ainda mantendo-se mais elevadas próximo a região de sobreposição das condições de fronteira. Além disso, não foi observado diferenças entre os gráficos para $\tilde{Z} \geq 0,005$, o que justifica-se com a teoria das soluções apresentada até aqui, dado que o aumento do número de autovalores é mais significativo para regiões muito próximas a entrada.

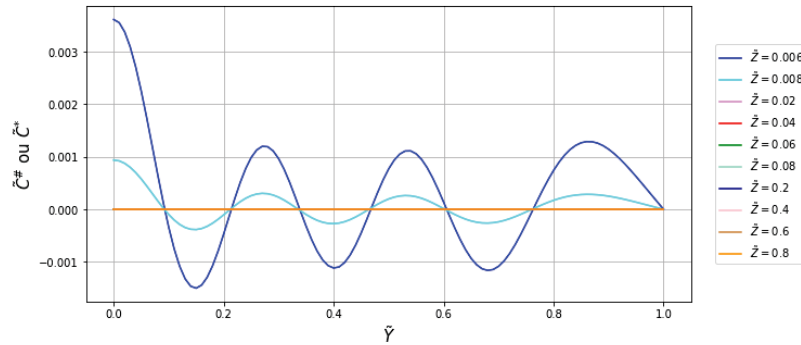


Figura 6.12: Diferenças dos perfis de concentração para $\tilde{Z} \geq 0,005$ comparando 75 ou 50 com 6 autovalores

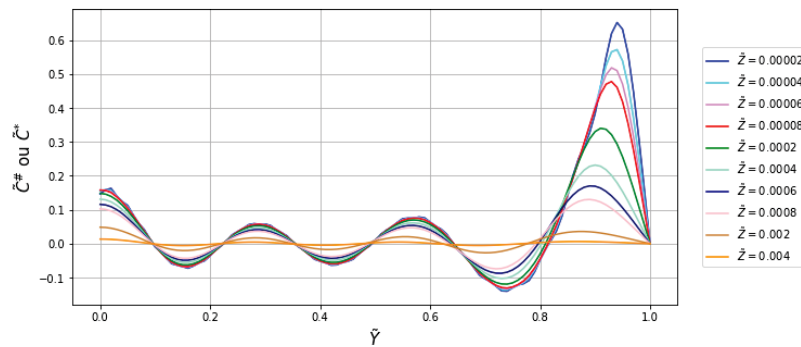


Figura 6.13: Diferenças dos perfis de concentração para $\tilde{Z} \leq 0,005$ comparando 75 ou 50 com 6 autovalores

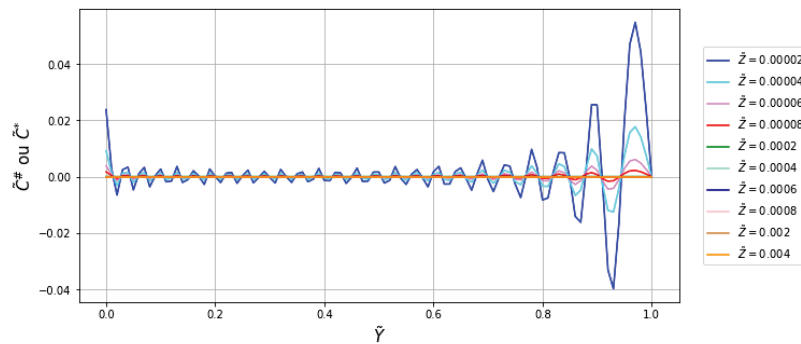


Figura 6.14: Diferenças dos perfis de concentração para $\tilde{Z} \leq 0,005$ comparando 75 com 50 autovalores

6.1.3 Resultados da concentração e de deposição no tubo

Determinados os valores dos coeficientes de difusão (Tabela. 2.1), foram fixados para teste desta seção os valores de $R = 0,002$ [m] para o raio, $L = 1$ [m] para o comprimento do tubo, de modo que atenda-se à premissa definida na modelagem de que $L \gg R$.

As análises a seguir seguem duas linhas gerais. Na primeira linha de análise avalia-se a concentração média e a taxa de deposição com base na variação da velocidade média do escoamento para algumas partículas de diâmetro especificado. Na segunda linha de análise avalia-se a concentração média e a taxa de deposição com variação do diâmetro de partícula em algumas velocidades médias do escoamento especificadas. Em suma, pode-se interpretar tais análises como uma análise de sensibilidade para se interpretar o comportamento do tubo aqui analisado como um meio filtrante.

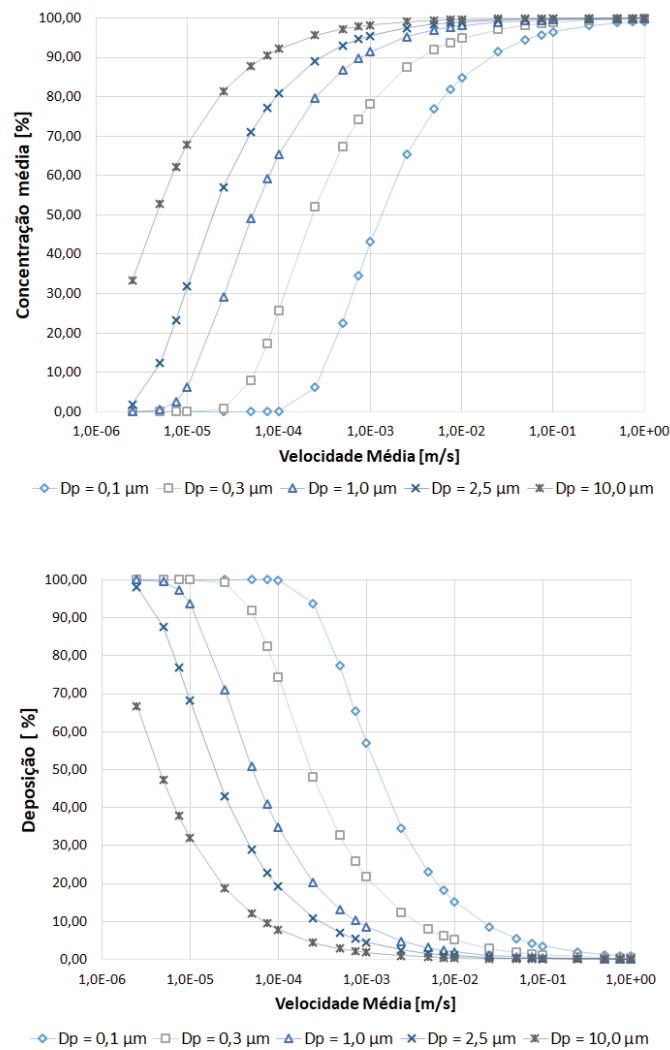


Figura 6.15: Concentração média e deposição para diferentes D_p variando \bar{U}

No primeiro caso considerou-se os diferentes valores para a velocidade média do perfil de Poiseuille variando numa faixa de $\bar{U} = 2,50 \times 10^{-06}$ até $\bar{U} = 1$ [m/s], sendo que essa faixa de \bar{U} foi adotada para se atender as especificações da modelagem, onde $Pe \gg 100$ e $Re < 2000$ (regime laminar). Logo, a concentração média e de deposição são apresentados na Figura 6.15 para diferentes valores de diâmetros de partículas. Já no caso da variação de D_p , considerou-se

os principais diâmetros normalmente estudados. Os valores de $D_p = 10,0 \text{ } [\mu\text{m}]$ e $D_p = 2,5 \text{ } [\mu\text{m}]$ são para olhar para as partículas ao qual aplicasse a regulamentação da legislação pertinente (MP₁₀ e MP_{2,5}), os valores de $D_p = 0,1 \text{ } [\mu\text{m}]$, $D_p = 0,3 \text{ } [\mu\text{m}]$ e $D_p = 1,0 \text{ } [\mu\text{m}]$ são definidos para ser valores interpostos.

A análise visual da Figura 6.15 atende o que se espera da física do problema, sendo que partículas menores tendem a se depositar mais sobre mesma velocidade média que partículas maiores, sendo desconsiderados os efeitos gravitacionais. Além disso, ao se comparar tais valores da concentração média e de deposição utilizando-se diferentes metodologias, como feito com os perfis de concentração, não foi identificado diferença significativa dos valores. As diferenças para os valores da concentração média e para a deposição foram encontradas aplicando-se diferentes números de autovalores em Gz_n^* e $Gz_n^\#$. Fato este coerente com o que foi observado, dado que aqui a concentração média e a deposição é avaliada em $\tilde{Z} = 1$.

Nesta configuração, olhando-se com maior atenção para as partículas de MP₁₀ e MP_{2,5}, que são as partículas hoje alvo de monitoramento mais significativo. Tem-se que com $\bar{U} = 2,50 \times 10^{-6} \text{ [m/s]}$ a deposição foi de 98,14% e com $\bar{U} = 1,00 \text{ [m/s]}$ a deposição foi 0,09% para MP_{2,5} considerando o uso de 75 autovalores. De forma similar, para MP₁₀ a deposição foi de 66,72% para $\bar{U} = 2,50 \times 10^{-6}$ e 0,08% para $\bar{U} = 1,00 \text{ [m/s]}$.

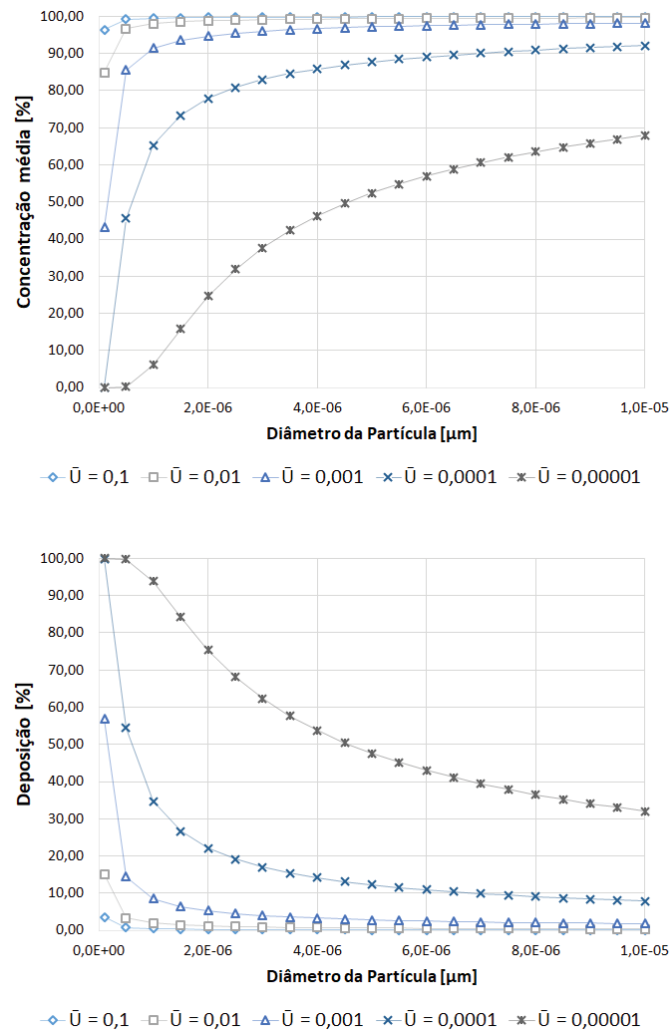


Figura 6.16: Concentração média e deposição para diferentes \bar{U} variando D_p

Além disso, com o emprego de 75 autovalores, a diferença na taxa de deposição foi mais significativa em velocidades maiores ao se comparar diferentes números de autovalores, tendo seu máximo atingido em $\bar{U} = 1,00$ [m/s]. O que ajudou a reduzir a superestimação prevista de deposição em 2,02% e 2,03%, para o MP_{2,5} e MP₁₀ respectivamente, em relação ao uso de 6 autovalores. Já em relação ao uso de 50 autovalores, ajudou a reduzir a superestimação prevista de deposição em 0,05% para o MP_{2,5} e também para o MP₁₀.

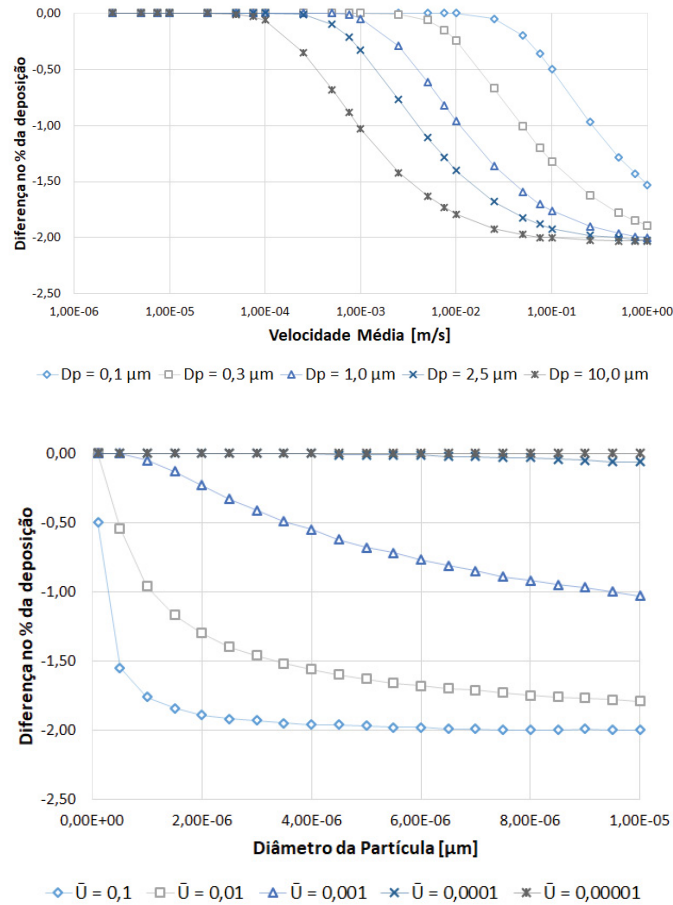


Figura 6.17: Diferenças na deposição para diferentes \bar{U} e D_p

Olhando-se agora para os números adimensionais, uma conclusão trivial associado ao próprio número adimensional é que os números adimensionais de Pe e de Gz possuem comportamento similar em ambos casos, seja variando a velocidade média ou o diâmetro da partícula, pois ambos dependem dos dois parâmetros. Já os números adimensionais de Re e de Sc possuem comportamento "inverso" variando a velocidade média e o diâmetro da partícula, pois ambos dependem de apenas um dos parâmetros que sofrem variação (\bar{U} e D_p).

As observações do comportamento dos números adimensionais podem ser visto nas Figuras 6.18 e 6.19, e em suma são condizentes com o esperado, dado a dependência de cada parâmetro fixado, e cada parâmetro variado e sua relação direta ou indireta com o respectivo número adimensional.

Nas Figuras 6.16 e 6.17, respectivamente, pode-se visualizar a concentração média e a taxa de deposição em relação a variação do diâmetro de partícula em algumas velocidades médias especificadas e também a diferença percentual com o emprego dos 75 autovalores. E em suma pode-se inferir que o emprego de soluções baseadas no emprego das funções hipergeométricas

confluentes inferem melhor solução que a aplicação direta do método de Frobenius e considerando que o uso de mais autovalores reduz a distorção de superestimação que é prevista na literatura.

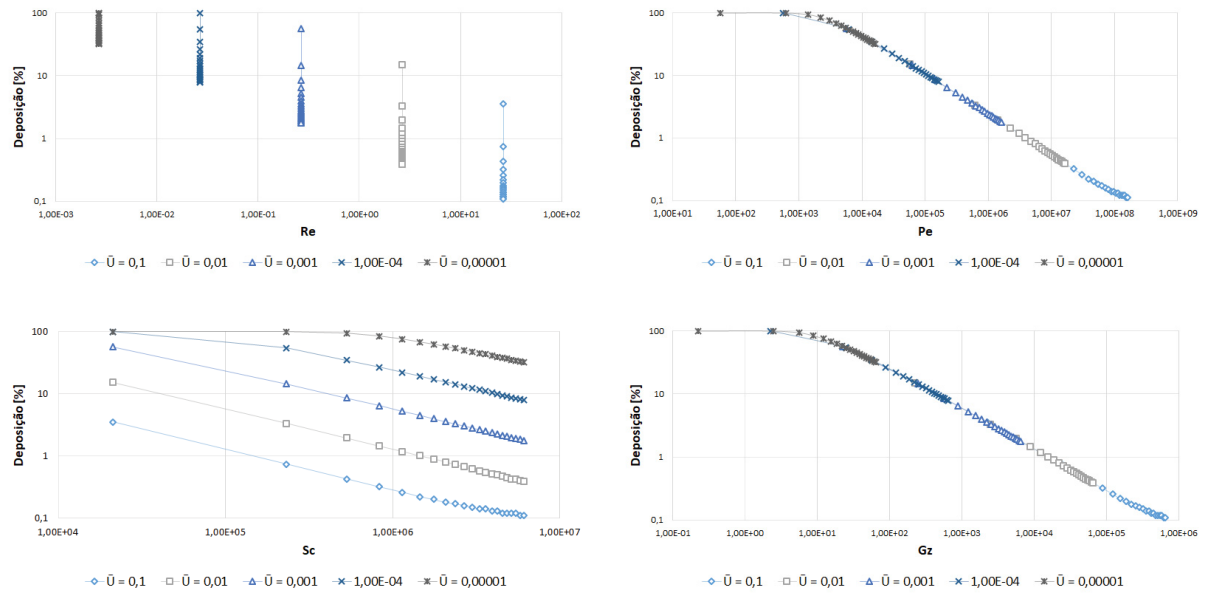


Figura 6.18: Comportamento dos números adimensionais em relação deposição para diferentes \bar{U} variando D_p

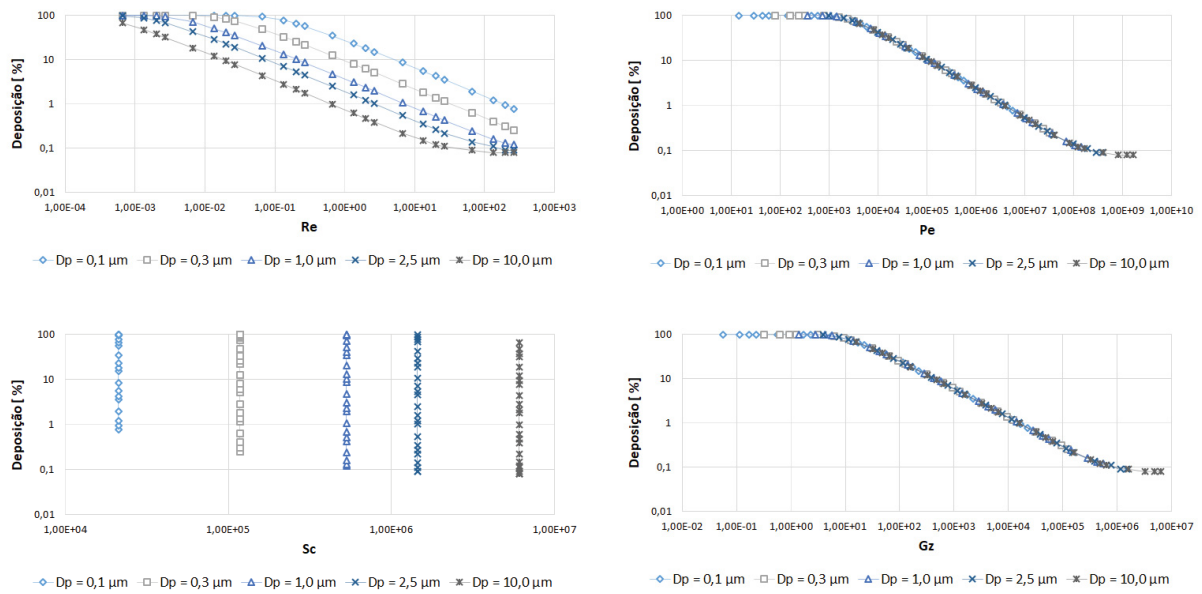


Figura 6.19: Comportamento dos números adimensionais em relação deposição para diferentes D_p variando \bar{U}

6.1.4 Perfis de concentração para MP_{10} e $MP_{2,5}$

Olhando-se agora com foco nas partículas de MP_{10} e $MP_{2,5}$, tem-se que é possível agrupar alguns casos para exemplificar o comportamento do escoamento e dos perfis de concentração. Sendo que os dados dos números adimensionais para estes casos são organizados na Tabela 6.5 para o MP_{10} (Figuras 6.20 até 6.24) e na Tabela 6.6 para o $MP_{2,5}$ (Figuras 6.25 até 6.29):

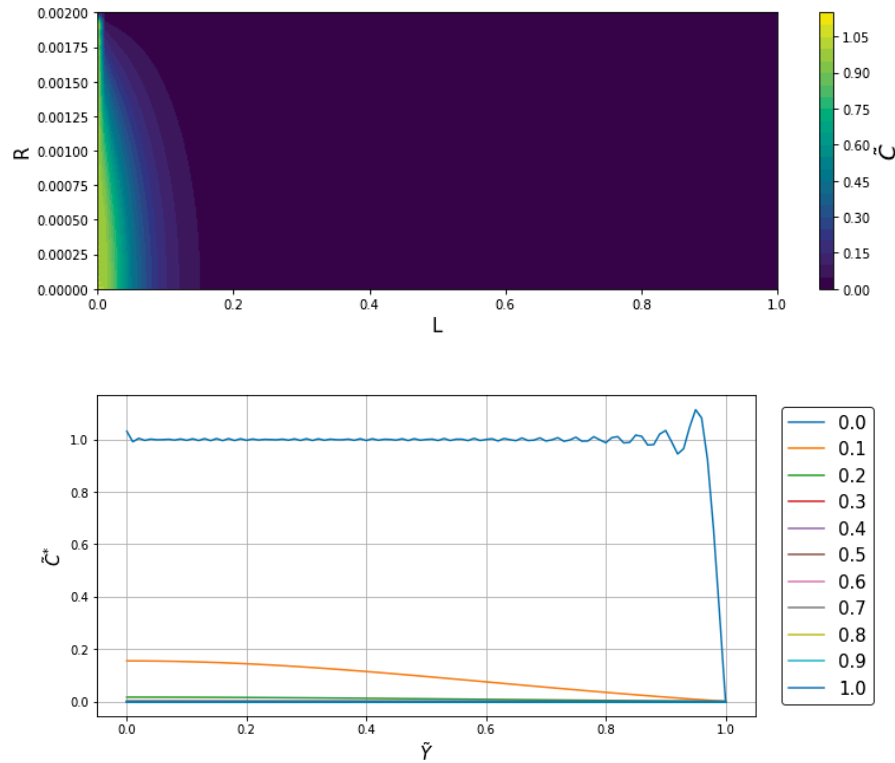
Tabela 6.5: Casos de 01 a 05 para MP_{10}

Caso	\bar{U}	Pe	Re	Sc	Gz	$\bar{\tilde{C}}(1)$	Deposição
01	1.00×10^{-07}	$1.622 \times 10^{+02}$	2.667×10^{-05}	$6.082 \times 10^{+06}$	6.488×10^{-01}	0,00	100,00
02	1.00×10^{-06}	$1.622 \times 10^{+03}$	2.667×10^{-04}	$6.082 \times 10^{+06}$	$6.488 \times 10^{+00}$	8,59	91,41
03	1.00×10^{-05}	$1.622 \times 10^{+04}$	2.667×10^{-03}	$6.082 \times 10^{+06}$	$6.488 \times 10^{+01}$	67,94	32,06
04	1.00×10^{-04}	$1.622 \times 10^{+05}$	2.667×10^{-02}	$6.082 \times 10^{+06}$	$6.488 \times 10^{+02}$	92,14	7,86
05	1.00×10^{-03}	$1.622 \times 10^{+06}$	2.667×10^{-01}	$6.082 \times 10^{+06}$	$6.488 \times 10^{+03}$	98,22	1,78

Tabela 6.6: Casos de 01 a 05 para $MP_{2,5}$

Caso	\bar{U}	Pe	Re	Sc	Gz	$\bar{\tilde{C}}(1)$	Deposição
01	1.00×10^{-06}	$3.865 \times 10^{+02}$	2.667×10^{-04}	$1.449 \times 10^{+06}$	$1.546 \times 10^{+00}$	0.01	99.99
02	1.00×10^{-05}	$3.865 \times 10^{+03}$	2.667×10^{-03}	$1.449 \times 10^{+06}$	$1.546 \times 10^{+01}$	31.83	68.17
03	1.00×10^{-04}	$3.865 \times 10^{+04}$	2.667×10^{-02}	$1.449 \times 10^{+06}$	$1.546 \times 10^{+02}$	80.84	19.16
04	1.00×10^{-03}	$3.865 \times 10^{+05}$	2.667×10^{-01}	$1.449 \times 10^{+06}$	$1.546 \times 10^{+03}$	95.49	4.51
05	1.00×10^{-02}	$3.865 \times 10^{+06}$	$2.667 \times 10^{+00}$	$1.449 \times 10^{+06}$	$1.546 \times 10^{+04}$	98.99	1.01

Nas Tabelas 6.5 e 6.6 os valores da $\bar{\tilde{C}}(1)$ e deposição são dados em [%]. E como esperado e apresentado por [McMurry \(2015\)](#); [Seinfeld e Pandis \(2016\)](#), tem-se que é possível observar que a perda de deposição de partículas seja maior na amostragem laminar adotada para pequenas partículas.

Figura 6.20: Perfil 2D e 1D para o Caso 01 de MP_{10}

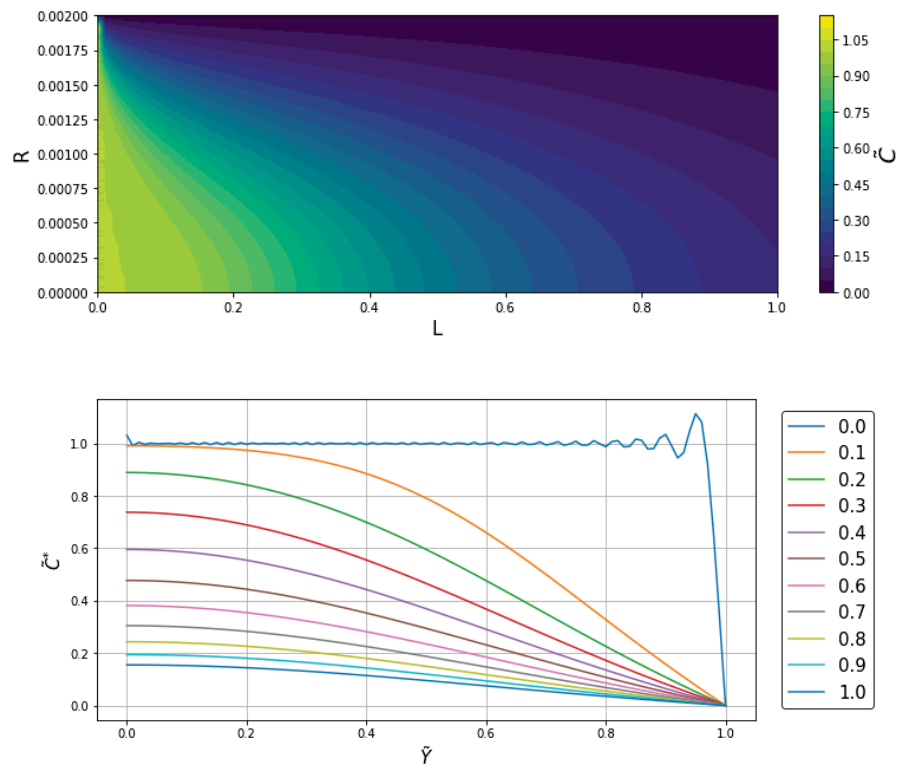


Figura 6.21: Perfil 2D e 1D para o Caso 02 de MP_{10}

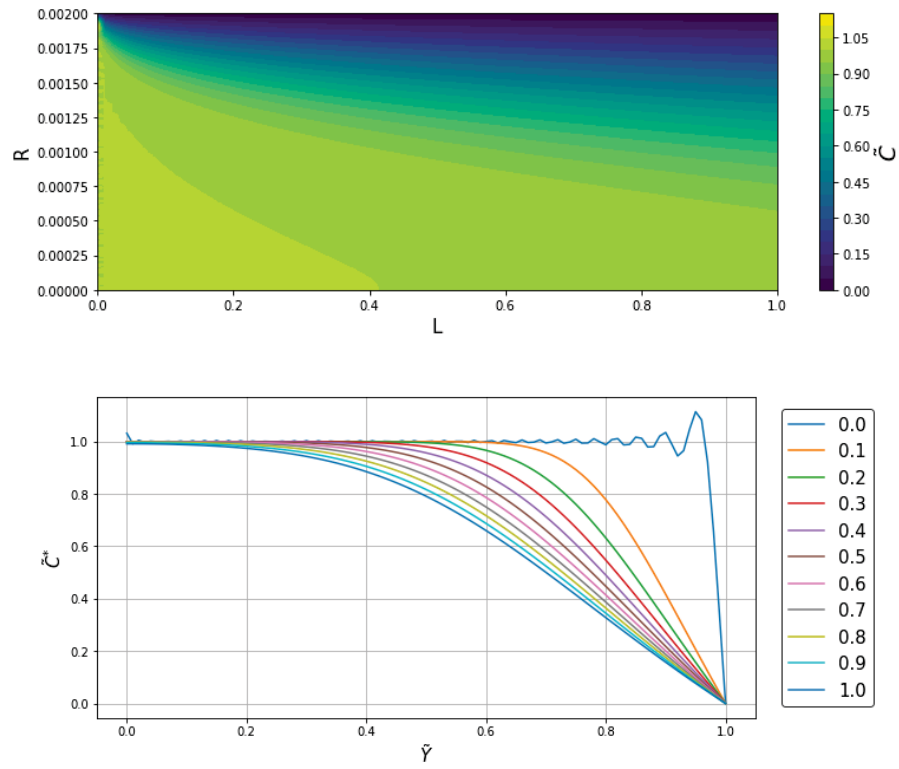


Figura 6.22: Perfil 2D e 1D para o Caso 03 de MP_{10}

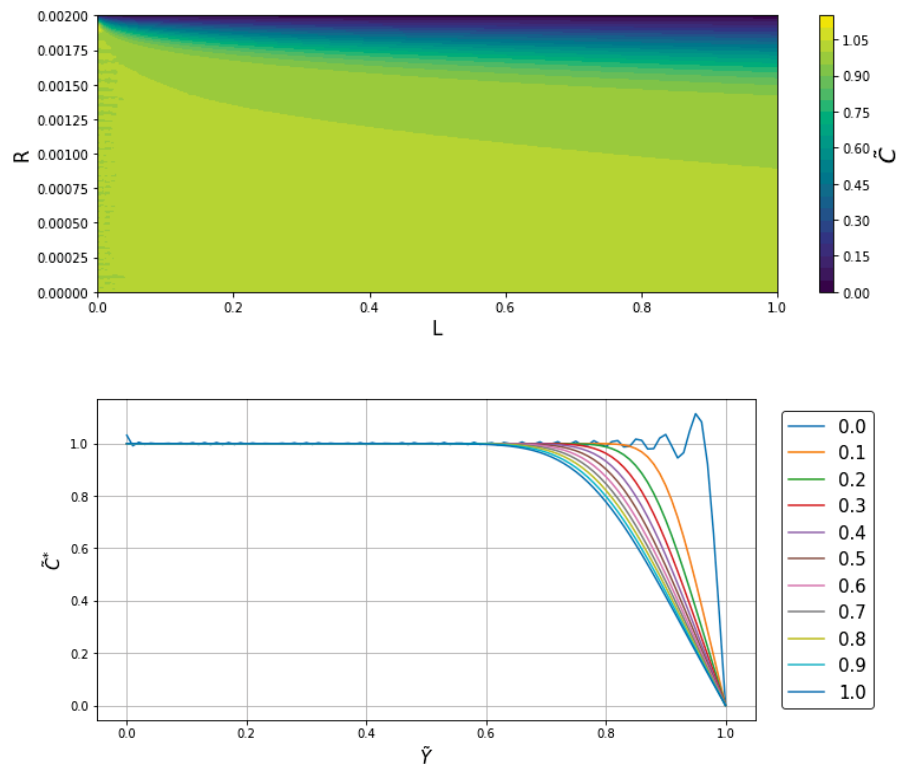


Figura 6.23: Perfil 2D e 1D para o Caso 04 de MP_{10}

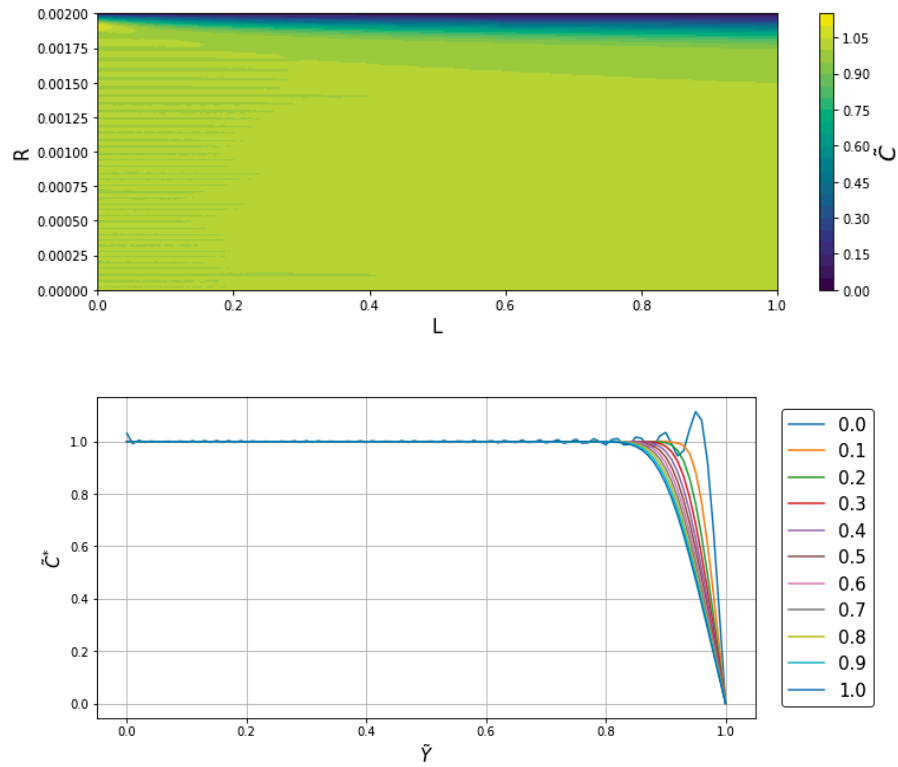


Figura 6.24: Perfil 2D e 1D para o Caso 05 de MP_{10}

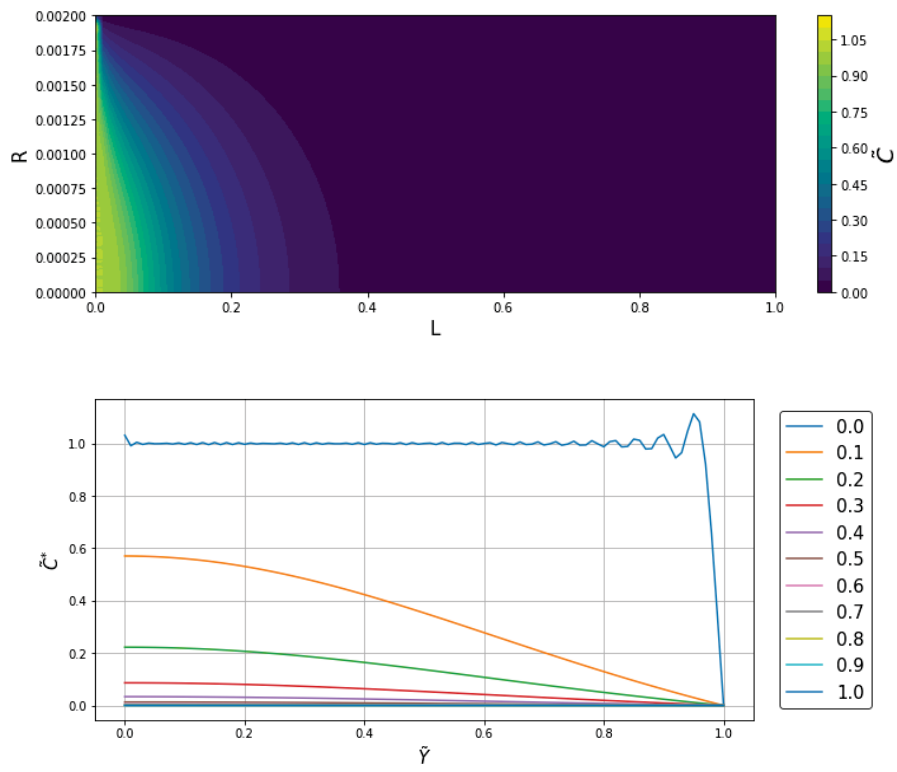


Figura 6.25: Perfil 2D e 1D para o Caso 01 de $MP_{2,5}$

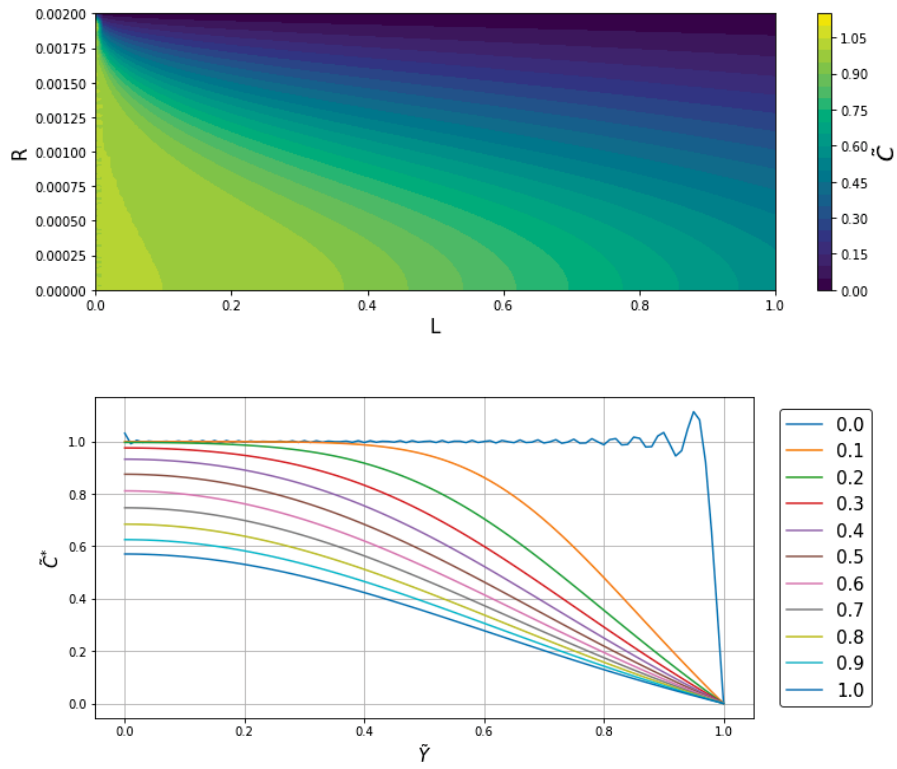


Figura 6.26: Perfil 2D e 1D para o Caso 02 de $MP_{2,5}$

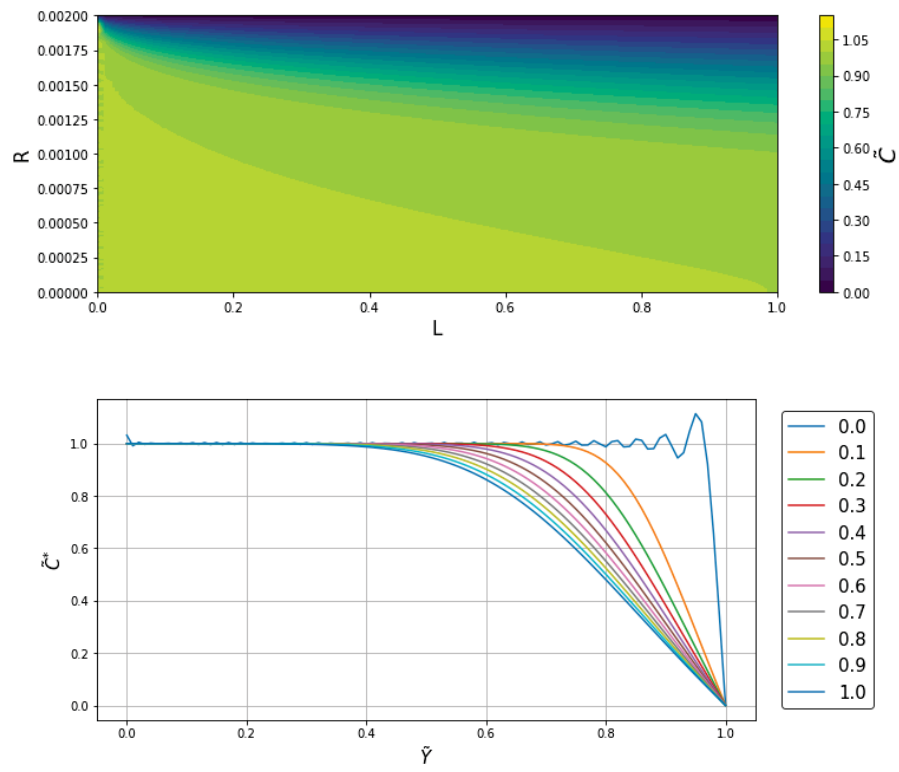


Figura 6.27: Perfil 2D e 1D para o Caso 03 de $MP_{2,5}$

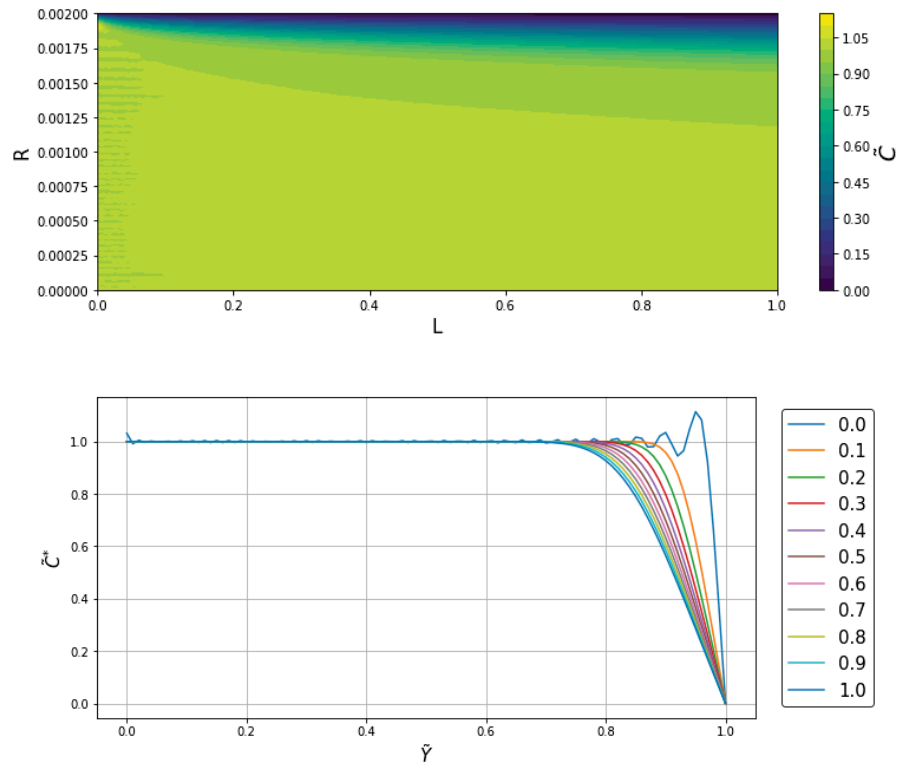


Figura 6.28: Perfil 2D e 1D para o Caso 04 de $MP_{2,5}$

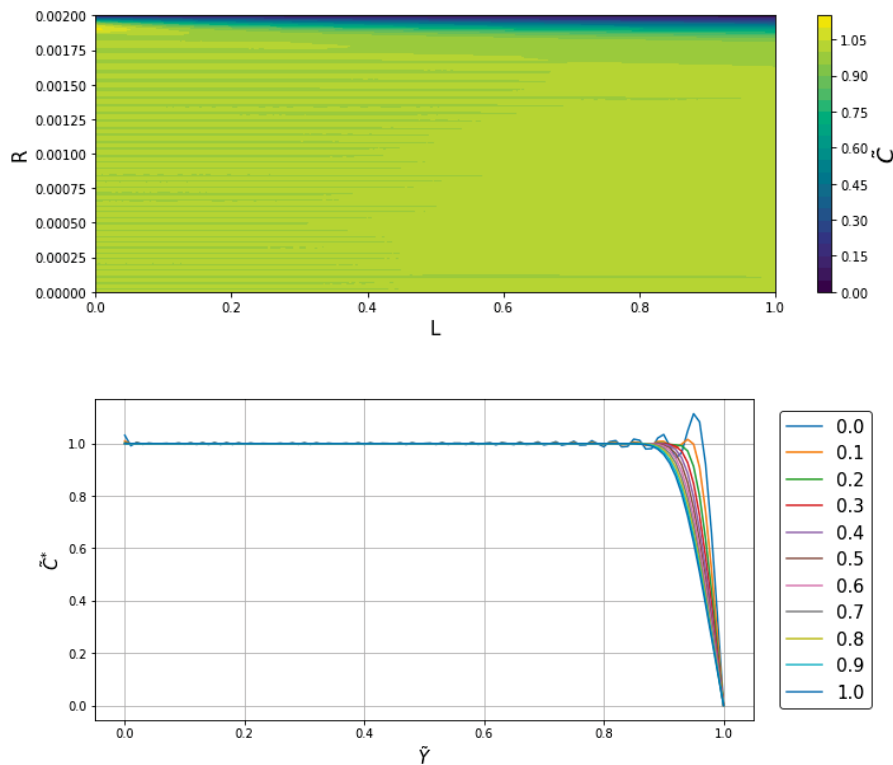


Figura 6.29: Perfil 2D e 1D para o Caso 05 de $MP_{2,5}$

6.1.5 Discussões sobre a isocinética

A concentração média da seção anterior é expressa para o caso onde $\tilde{Y} = 1$, ou seja, em toda direção radial do tudo. Nesta seção, busca-se verificar para as soluções propostas a condição de isocinética, similarmente como apresentado por [Tyree e Allen \(2004\)](#). Nesse contexto, a solução da concentração é aqui integrada perto do centro do fluxo principal para determinar a perda de partículas de MP amostrados isocineticamente, ou seja, até um valor \tilde{Y}_1 que seja menor que o raio R .

Para este caso um sonda de amostragem isocinética pode ser idealizada para medir a concentração na tubulação. Este amostrador isocinético utilizado possui um raio r_1 , e deste modo a nova relação adimensional radial de medida é estabelecida em relação ao raio deste amostrador, dada pela relação $\tilde{Y}_1 = \frac{r_1}{R}$ (Figura 6.30). Ou seja, esta razão medida pode ser usada para se avaliar a eficiência de amostragem de diferentes tamanhos de raio do amostrador.

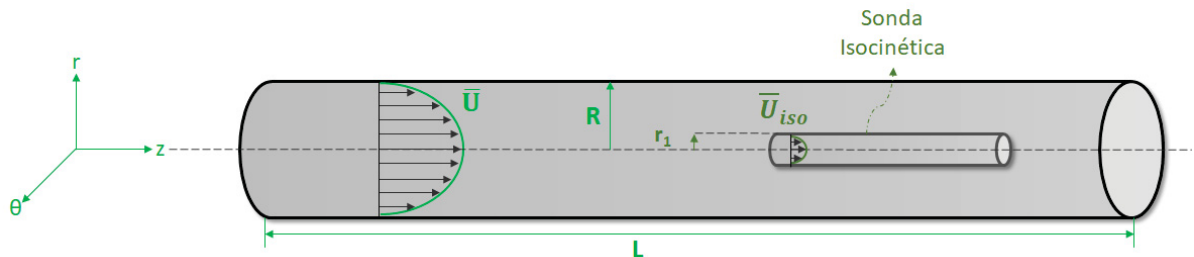


Figura 6.30: Geometria do tubo com sonda isocinética

Para Tyree e Allen (2004), as perdas por difusão de partículas pode ser minimizada se a entrada isocinética for projetada usando a relação de eficiência, aqui resolvida com base na formulação problema de Graetz estendido. Nesse sentido, usando o conceito de eficiência de amostragem expresso pela equação 2.1 e a concentração média dada pela equação 4.30, tem-se que uma associação de ambas em conjunto com a condição de entrada ($\tilde{C}(\tilde{Y}, 0) = 1$) permite obter uma expressão para determinar a eficiência de amostragem (Tyree e Allen, 2004), dada por:

$$\eta = \frac{\int_0^{\tilde{Y}_1} \tilde{C}(\tilde{Y}, \tilde{Z}) \tilde{Y} (1 - \tilde{Y}^2) d\tilde{Y}}{\int_0^{\tilde{Y}_1} \tilde{Y} (1 - \tilde{Y}^2) d\tilde{Y}} \quad (6.3)$$

Logo, na Figura 6.31 é apresentados as eficiências de amostragem para diferentes tamanhos de amostradores. Considera-se aqui o caso das funções hipergeométricas e também o método de Frobenius aplicando 6, 50 e 75 autovalores.

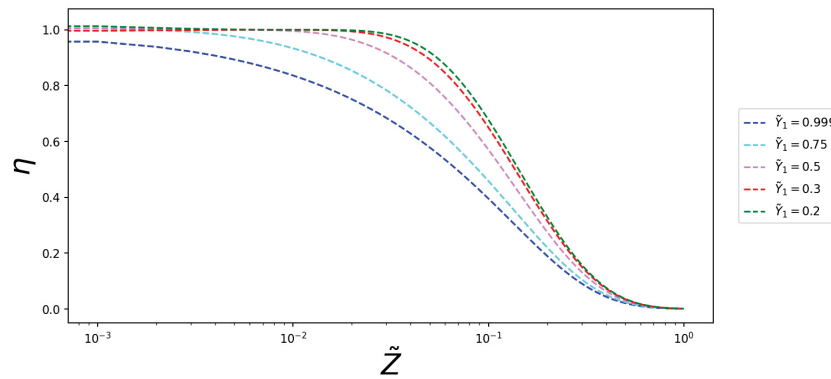


Figura 6.31: Eficiência de amostragem para as 3 soluções

Visualmente ao se comparar os perfis não foi identificado diferença, seja variando o número de autovalores ou empregando-se métodos diferentes. Nesse sentido, foi avaliado a diferença entre os as curvas de eficiência (Figura 6.32) com o uso das métricas MAE e RMSE já definidas anteriormente. Nota-se que a principal diferença foi o emprego das séries diferentes obtidas pelas funções hipergeométricas, sendo que o MAE = $6,32686 \times 10^{-17}$ e o RMSE = $2,39875 \times 10^{-16}$. E o resultado para o erro é semelhante ao observado na seção 6.1.2, mostrando-se assim que todas as soluções aqui estudadas podem ter análises baseadas no princípio da amostragem isocinética.

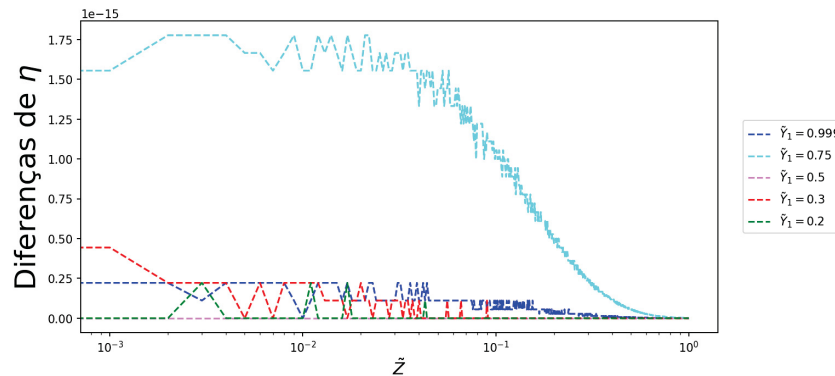


Figura 6.32: Eficiência de amostragem com 75 autovalores - Comparando Whittaker e a Nova proposição

6.2 RESULTADOS SOLUÇÃO NUMÉRICA

As soluções numéricas nesta seção são discutidas do ponto de vista da aproximação com o resultado analítico com 6 e 75 autovalores. Deste modo é possível analisar qual o melhor refinamento de malha a se empregar, ou seja, qual a relação entre o número de nós radiais e axiais mais aproxima a solução numérica da solução analítica sobre mesmas configurações.

Em testes preliminares verificou-se que o refinamento da malha na discretização é mais significativo na direção radial do que na direção axial, o que justifica-se principalmente pelo efeito difusivo ser mais significativo no problema de estudo. Assim os casos foram agrupados de 01 a 05, variando-se o número de autovalores em diferentes refinamentos de malha, sendo apresentados com os respectivos MAE e RMSE de cada caso (Tabela 6.7).

Nas Figuras 6.33 à 6.37 é possível verificar as diferenças entre a solução analítica e numérica, sendo apresentados os perfis 1D (Analítico e Numérico), 2D (Numérico) e um gráfico das diferenças entre o numérico e o analítico 1D. Essas figuras são dos resultados com 75 autovalores, sendo que a diferença principal dos gráficos de 6 autovalores está nas oscilações que aparecem na curva $\tilde{Z} = 0,01$ similar ao que foi apresentado na Figura 6.12.

Tabela 6.7: MAE e RMSE - Solução Analítica \times Numérica

Caso	Malha	75 autovalores		6 autovalores	
		MAE	RMSE	MAE	RMSE
01	$k = 0,01$ e $h=0,1$	$7,46654 \times 10^{-00}$	$1,86998 \times 10^{-00}$	$6,50430 \times 10^{-01}$	$5,47179 \times 10^{-01}$
02	$k = 0,01$ e $h=0,01$	$5,75255 \times 10^{-01}$	$3,77875 \times 10^{-01}$	$5,18035 \times 10^{-02}$	$1,16464 \times 10^{-01}$
03	$k = 0,01$ e $h=0,001$	$4,48024 \times 10^{-02}$	$6,44612 \times 10^{-02}$	$4,50265 \times 10^{-03}$	$2,36229 \times 10^{-02}$
04	$k = 0,01$ e $h=0,0001$	$3,77260 \times 10^{-02}$	$2,07064 \times 10^{-02}$	$3,69805 \times 10^{-03}$	$1,04413 \times 10^{-02}$
05	$k = 0,01$ e $h=0,00001$	$3,48036 \times 10^{-02}$	$1,68481 \times 10^{-02}$	$3,39007 \times 10^{-03}$	$8,27119 \times 10^{-03}$

Partindo-se do Caso 01 e olhando-se para o perfil radial em algumas posições axiais observa-se que a solução diverge principalmente na região próxima à parede. Essa divergência se acentua a partir da metade da posição axial (Figura 6.33). Para o Caso 02 tem-se que a divergência mantém-se próxima a parede, acentua-se a partir de $\tilde{Y} = 0,8$ (Figura 6.34). Nesta mesma linha para o Caso 03 tem-se a divergência mantém-se próxima a parede, acentua-se a partir de aproximadamente $\tilde{Y} = 0,90$ (Figura 6.35). Por fim, para os Caso 04 e Caso 05 tem-se a divergência mantém-se próxima a parede, acentua-se a partir de aproximadamente $\tilde{Y} = 0,95$, mas no Caso 05 com diferença significativa apenas em $\tilde{Z} = 0,01$ (Figuras 6.36 e 6.37).

Conclui-se então que a comparação da solução analítica e numérica apresentou melhor resultado quando ao refinamento da malha foi o Caso 05 ($k = 0,01$ e $h = 0,00001$) dado a análise gráfica e por possuírem menor MAE e RMSE. Sendo que no Caso 05 (Figura 6.37) substituiu-se o gráfico das diferenças entre o numérico e o analítico 1D, já que é similar ao caso anterior, e foi apresentado em seu lugar o perfil de concentração ao longo de \tilde{Z} em alguns pontos radiais.

6.2.1 Solução numérica com condição de entrada diferente da solução analítica

Considera-se agora uma condição de contorno diferente para o início do tubo, na seção transversal que tem a entrada do escoamento de ar e partículas. Considera-se agora uma fonte de material particulado pontual e constante na entrada do tubo ($\tilde{Z} = 0$) em diferentes pontos radiais, $\tilde{Y} = 0,00$, $\tilde{Y} = 0,10$, $\tilde{Y} = 0,25$, $\tilde{Y} = 0,50$, $\tilde{Y} = 0,75$ e $\tilde{Y} = 0,90$. Nas Figuras 6.38 e 6.39 é possível visualizar os comportamentos em alguns pontos ao longo de \tilde{Y} e \tilde{Z} respectivamente. Os resultados do perfil de concentração encontram-se como esperado, com característica de uma “onda” ao longo da direção radial e axial.

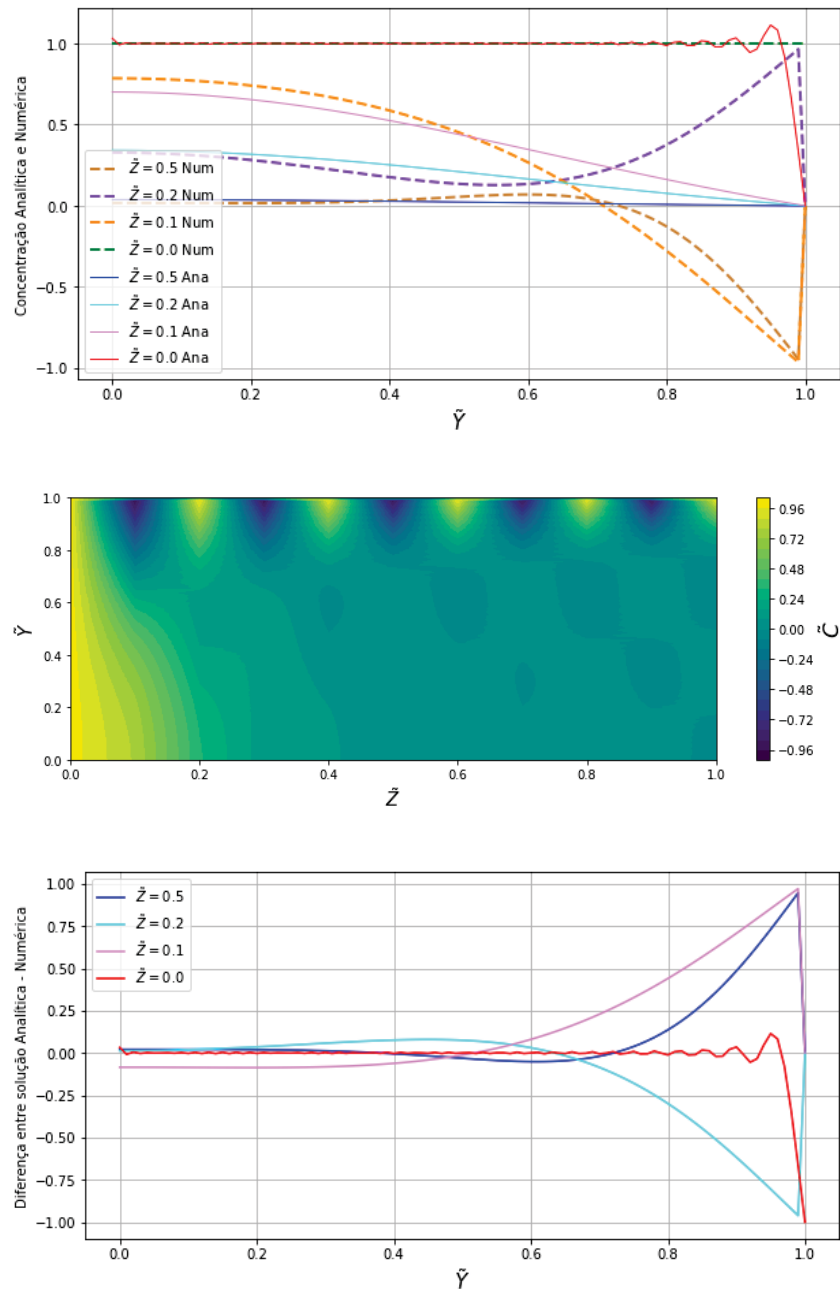


Figura 6.33: Comparação solução Numérica e Analítica - Caso 01

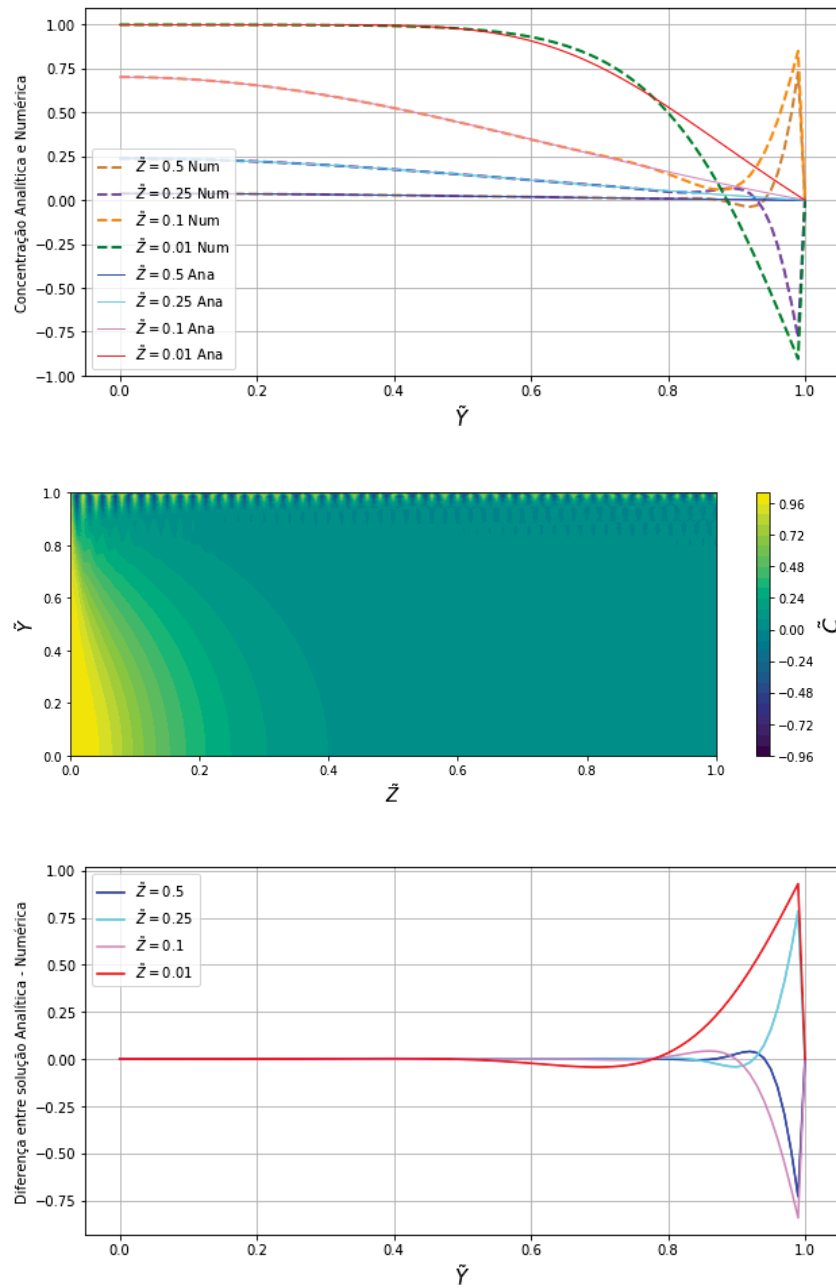


Figura 6.34: Comparação solução Numérica e Analítica - Caso 02

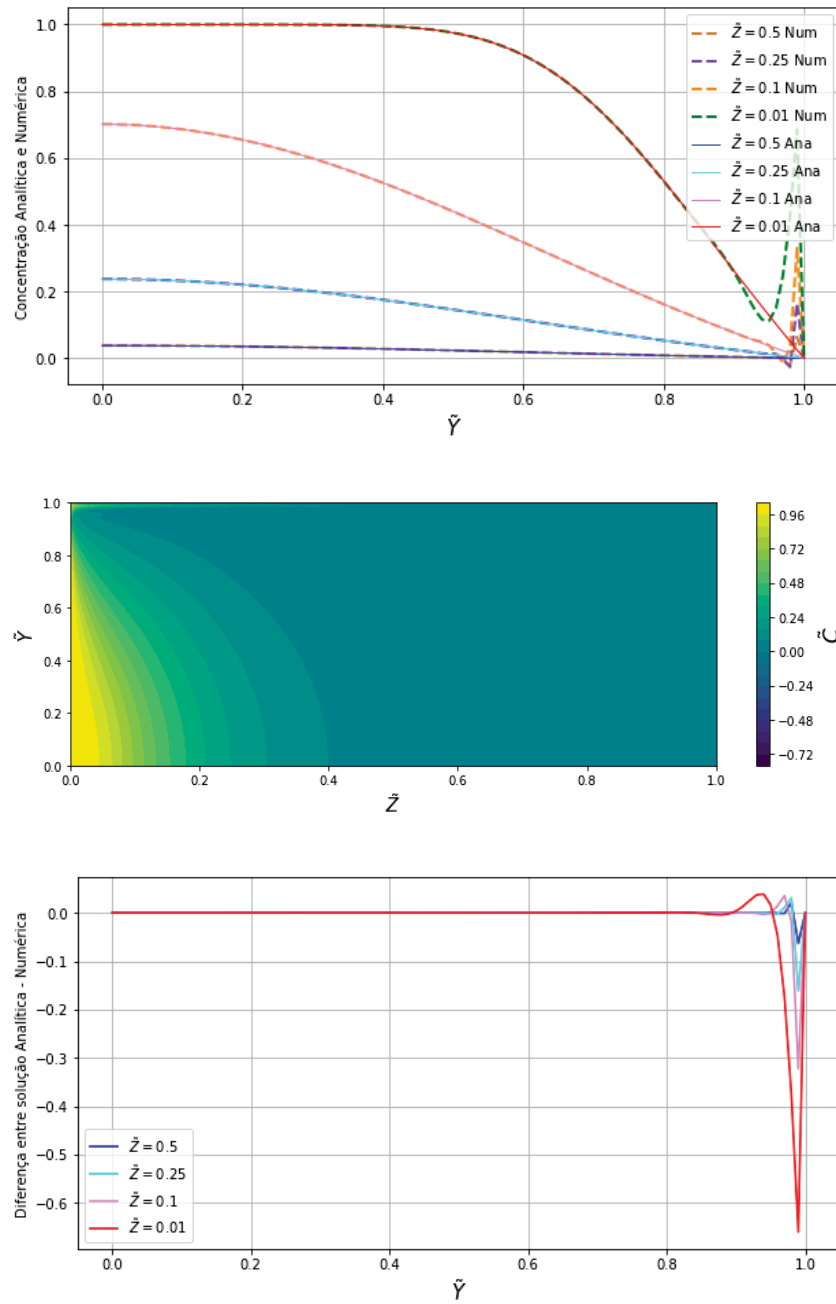


Figura 6.35: Comparação solução Numérica e Analítica - Caso 03

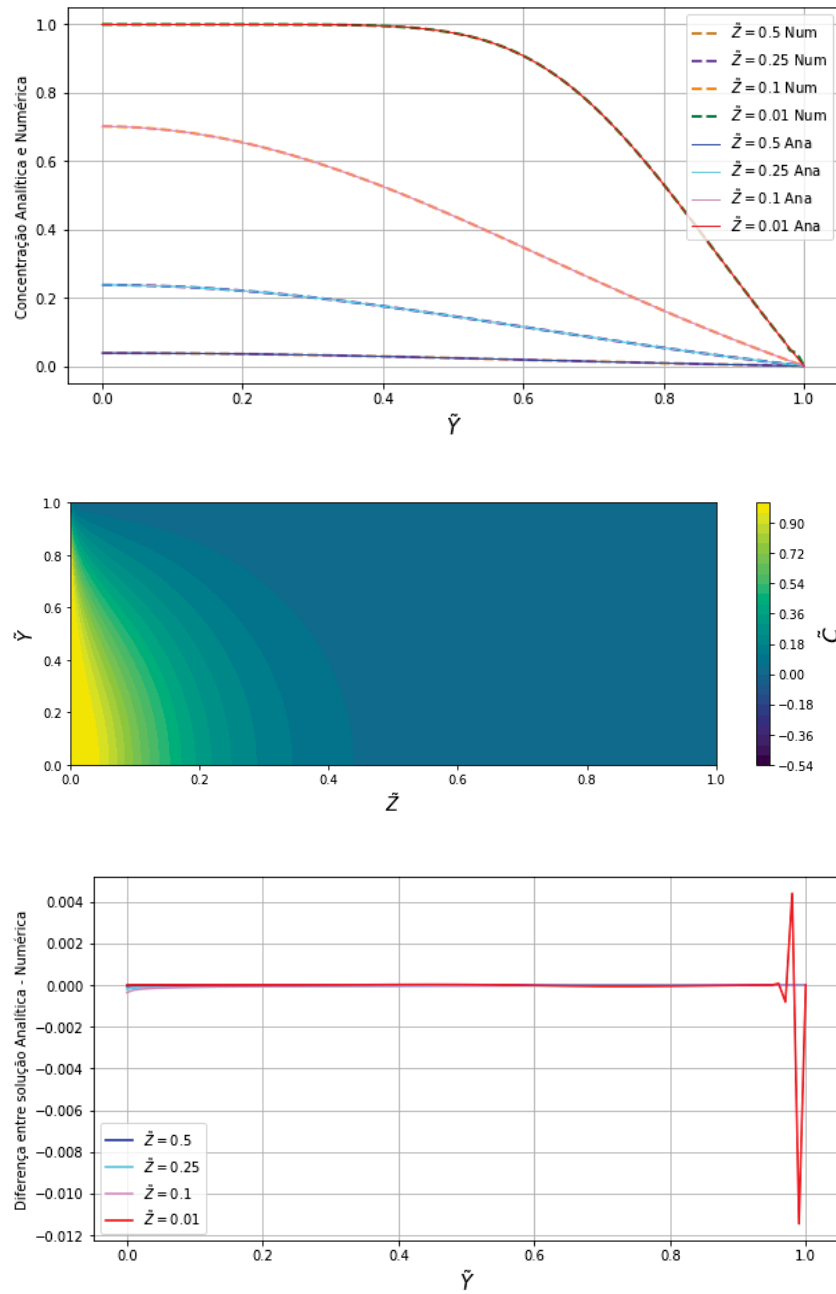


Figura 6.36: Comparação solução Numérica e Analítica - Caso 04

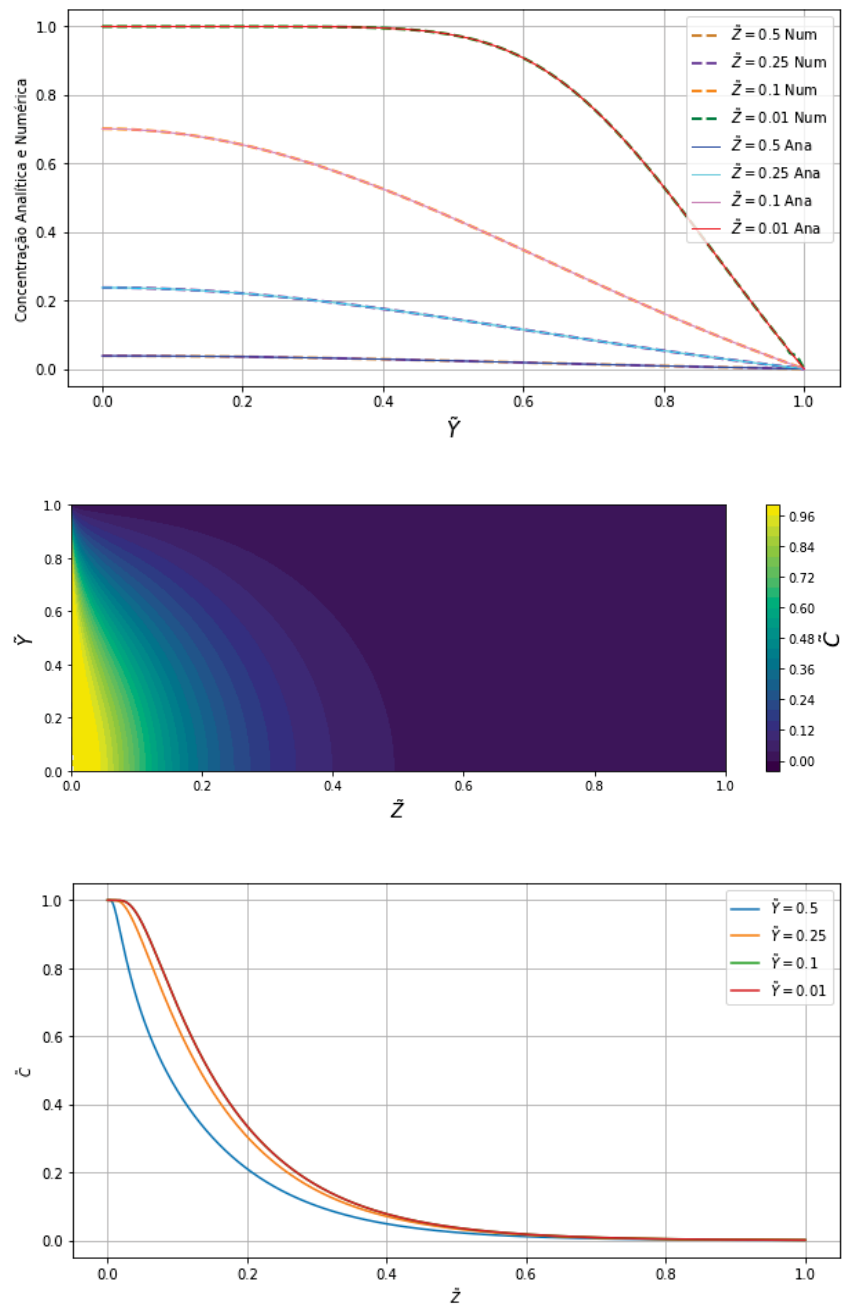


Figura 6.37: Comparação solução Numérica e Analítica - Caso 05

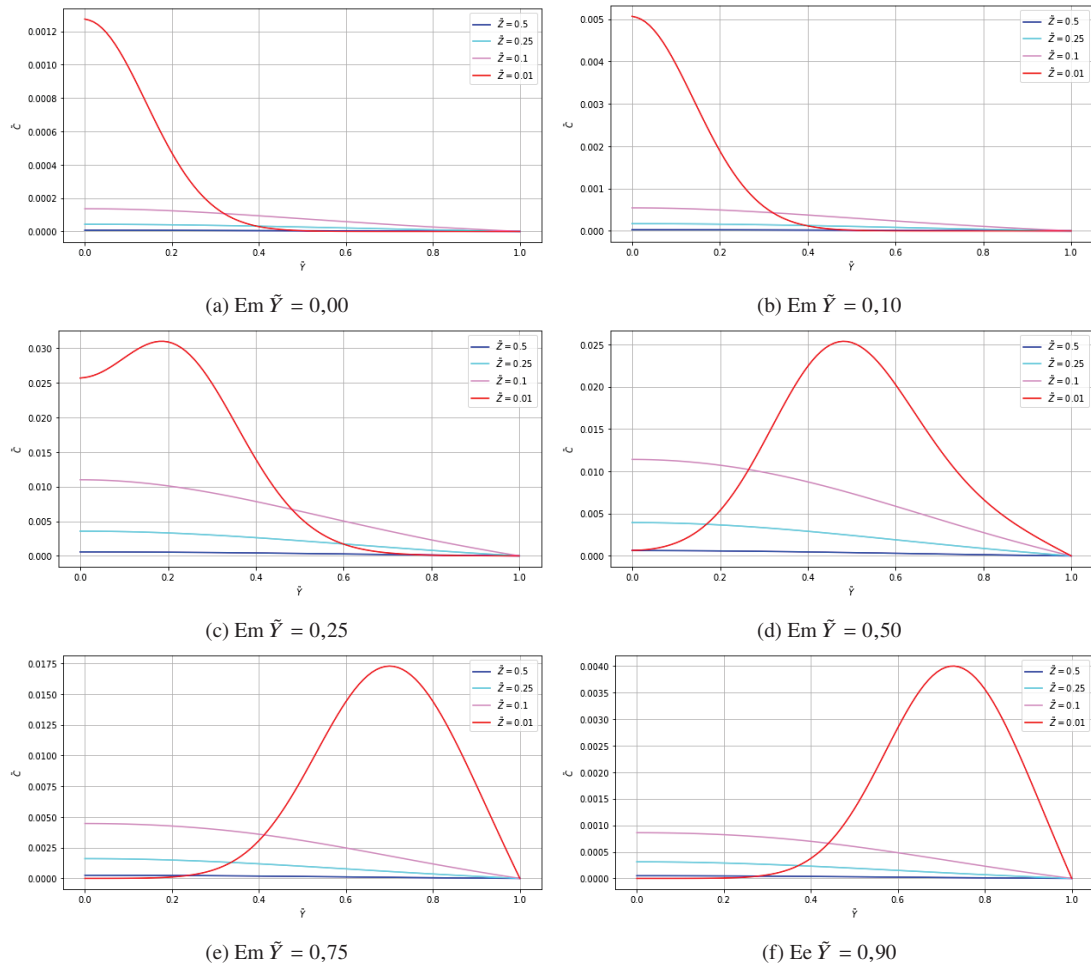


Figura 6.38: Perfil numérico ao longo de \tilde{Y} para fonte pontual em diferentes posições radiais

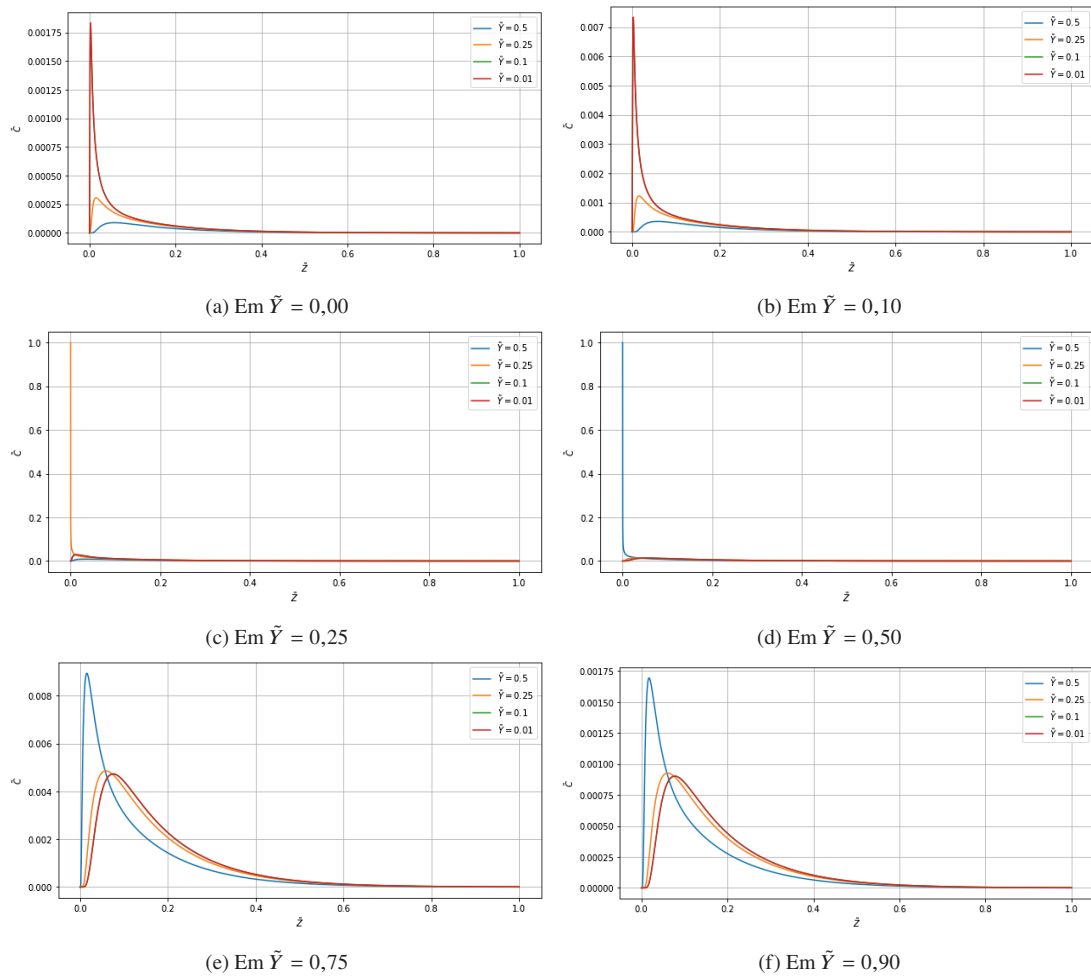


Figura 6.39: Perfil numérico ao longo de \tilde{Z} para fonte pontual em diferentes posições radiais

7 CONSIDERAÇÕES FINAIS

As soluções exatas de equações diferenciais desempenham um papel importante na compreensão adequada de características quantitativas de muitos fenômenos, como o caso aqui em particular: o da dispersão e deposição de MP em um tubo simétrico com escoamento laminar e permanente. As soluções podem ser usadas para verificar a consistência e estimar erros de soluções numéricas, assintóticas, e métodos analíticos aproximados.

Fisicamente, a solução geral do problema reflete o que se espera para o fenômeno em análise. Nesse sentido, a distribuição de concentração ao longo do tubo para valores de \tilde{Z} é expressa por uma série, à medida que este valor aumenta, a influência dos últimos termos da série diminui rapidamente se comparados com os anteriores, dado fator exponencial, presente na solução geral.

Tem-se também, que o uso do método de aproximação em série, como ferramenta na obtenção de soluções da equação diferencial do problema de dispersão e deposição de MP em uma configuração específica, se mostra aplicável. Mas é passível de se concluir da análise dos resultados que o problema apresenta equações diferenciais parciais com coeficientes rapidamente oscilantes.

Sabe-se que a solução geral de uma equação linear e homogênea de segunda ordem como a apresentada pela equação A.3, pode ser escrita na forma de $y(x) = Ay_1(x) + By_2(x)$, sendo $y_1(x)$ e $y_2(x)$ linearmente independentes. E como apresentado, para o caso da aplicação direta do método de Frobenius no problema de estudo, a solução é dada pela equação 4.16.

Além disso, é importante destacar que o método de Frobenius mostra uma limitação no número de autovalores para a solução. Esta observação pode ser atrelado ao fato a expansão em série de potência em torno do ponto $x_0 = 0$ confluir para o caso em que as raízes indiciais da solução são iguais. Neste caso, só se consegue uma única solução na forma da série, o que requer um procedimento adicional para se encontrar uma segunda solução linearmente independente.

Outro fator para a limitação aqui apresentada está atrelado as condições de contorno e o comportamento da função $P(x)$ (equação A.16) nas fronteiras do domínio. O comportamento desta função permite analisar três classes do problemas de Sturm-Liouville, sendo chamados de problemas regular, periódico e singular.

Para o problema aqui estudado, na equação 4.13¹ as funções $P(\tilde{Y})$ ou $S(\tilde{Y})$ se anulam em alguma das extremidades do intervalo do domínio da função $[0,1]$. Logo, tem-se que $P(0) = 0$ e portanto, um problema singular de Sturm-Liouville.

Sabe-se que para o caso de problemas singulares, a condição de contorno imposta neste ponto singular é de forma que se exige que a função seja limitada neste ponto. Isto implica que a solução não pode tender a mais ou menos infinito nesta extremidade, mantendo assim uma representação coerente de um processo físico. Portanto, a singularidade em $x_0 = 0$ e a própria função permite que sua solução geral possa ser obtida através do método de Frobenius. Mas esbarra-se no problema no ponto de contorno.

A segunda solução linearmente independente pode ser expressa por (Kreider, 1966):

$$y_2(x) = y_1(x) \ln x + \sum_{n=1}^{\infty} b_n x^{n+j}, \quad b_n = a'_n(j) \quad (7.1)$$

¹onde $P(\tilde{Y}) = \tilde{Y}$, $Q(\tilde{Y}) = 0$, $S(\tilde{Y}) = \tilde{Y}(1 - \tilde{Y}^2)$ e $\sigma = \lambda^2$

Mas a condição na linha central (4.15) exige que a solução seja limitada em $\tilde{Y} = 0$. As função dada pela série $y_1(x) \equiv Gz(\tilde{Y})$ é limitada na origem, porém as funções $y_2(x)$ tendem a menos infinito, dado a presença do fator logarítmico. Dessa forma, para que a solução geral permaneça limitada, deve-se impor que $B = 0$, de forma que a solução geral será apenas a série obtida pelo método de Frobenius.

Logo a série, obtida pela aplicação direta do método de Frobenius resultante, é válida apenas onde ela converge e, como já descrito anteriormente, a partir de $\lambda_n > 45$ a série diverge e extrapola exponencialmente a condição de fronteira do problema proposto. Portanto, a aplicação do método de Frobenius de forma direta, se mostra limitado em relação às demais soluções apresentadas dado o grupo de funções hipergeométricas possuem propriedades de convergência superiores.

A vantagem do emprego das soluções nos termos das funções hipergeométricas confluentes, é a possibilidade de se avaliar o comportamento assintótico da solução, dado que, tal comportamento pode ser convenientemente obtido pelas representações integrais dessas hipergeométricas de primeiro e segundo tipo. Logo, a natureza da série da solução geral é um fator trivial para uma boa análise dos resultados e deve ser levada em consideração. Necessitando assim, ser analisada cuidadosamente, dado que as séries Gz_n , Gz_n^* e $Gz_n^\#$ apresentam limitações ao problema de estudo, atrelados principalmente ao comportamento assintótico ou não assintótico da série.

O emprego de um número maior de autovalores, bem como a adoção da nova solução analítica, mostra-se aprimorar o uso do problema de Graetz estendido. Principalmente, na sub-região a montante do problema de estudo, dado que o comportamento assintótico aumenta a convergência. Portanto, a série assintótica obtida, mostra-se representativa para estimativas dos perfis de concentração, da concentração média e da deposição, por exibir bons padrões de convergência.

Em linhas gerais, este estudo apresenta exatidão assintótica e métodos analíticos aproximados para resolver equação diferencial linear do problema. O escopo de modelagem e discussão, perpassa por propriedades básicas de funções especiais, aqui representadas pelo grupo das funções hipergeométricas, bem como o uso direto do método de solução em série.

Um ponto de partida para as conclusões, sobre o porquê há divergências dos métodos empregados, é atrelada a convergência da solução. Nos resultados, identificou-se que o método de Frobenius aplicado diretamente para a obtenção da solução geral do problema de estudo possui algumas limitações. Limitações estas, dado principalmente pela não convergência em toda região de interesse, sendo que as aproximações assintóticas, resultantes da resolução pelo emprego das transformações de variáveis mostraram ter melhor aplicabilidade e convergência para a resolução do problema de estudo. Além disso, conclui-se nesse contexto, que a equação proposta por [Sellars et al. \(1954\)](#) representa adequadamente uma sequência para os autovalores aplicáveis a esse grupo de solução e que se mostra menos instável a medida que um número maior de autovalores é empregado na solução.

Sobre a análise da deposição, pode-se concluir que, de certo modo, a inércia do fluido é ignorada quando o número de Reynolds associado está próximo de zero, devido principalmente às dimensões do canal e à baixa velocidade de fluxo. Nesse sentido, as características de fluxo do número de Reynolds quase zero reduzem as equações de Navier-Stokes às equações de Stokes, que podem descrever comportamentos gerais de fluxo de microcanais. Nesse contexto, pode-se assimilar que as partículas tendem a se depositar mais na parede. No entanto, quando os números de Reynolds se tornam finitos, as partículas tendem a não se depositar.

O problema de estudo aqui proposto, leva em consideração o caso em que aqui há convecção e difusão combinadas. Nesse tipo de situação, pode se enquadrar o problema de

Graetz estendido e o problema de L  v  que, que    uma deriva  o do problema de Graetz. A solu  o L  v  que se concentra na regi  o de entrada do tubo onde o desenvolvimento do perfil, de concentra  o, apresenta oscila  es, dado pelo fato de na regi  o de entrada, a taxa de transfer  ncia se torna infinita e muitos termos da s  rie Graetz s  o necess  rios para obter resultados precisos. Nos testes aqui apresentados, houve uma minimiza  o de oscila  es com o emprego de mais autovalores, sem grande custo de processamento computacional para an  lise dos resultados.

Do ponto de vista da isocin  tica, as varia  es da solu  o ocorrem de acordo com a s  rie empregada e, n  o com o n  mero de autovalores. Tem-se tamb  m, que do ponto de vista num  rico, os perfis de solu  o com o devido refinamento da malha apresentam comportamento com menor erro em rela  o a solu  o anal  tica para o Caso 05 ($h = 0,01$ e $k = 0,00001$) para uma fonte constante e uniforme na dire  o radial na se  o de entrada. Portanto, pode-se dizer que o esquema se torna est  vel apenas para algumas condi  es espec  ficas da malha, onde o tamanho do passo na dire  o radial precisa ser 10^{-4} vezes menor do que o tamanho do passo na dire  o axial, para reduzir a diferen  a entre a solu  o anal  tica e num  rica. Para uma fonte pontual constante em diferentes pontos da dire  o radial a representa  o num  rica tamb  m apresenta um comportamento de acordo com o esperado.

A abordagem com a condi  o de contorno no in  cio do tubo diferente da solu  o anal  tica, mostra a possibilidade de extens  o do problema de forma mais simplificada que a expans  o em s  rie. Deste modo,    poss  vel testar a equa  o do problema a outro grupo de fontes com o emprego do esquema num  rico proposto, como no caso testado (pontuais e cont  nuas). Sendo que, em an  lises futuras, podem ser abordadas outras configura  es de contorno.

Nesse cerne, a interpreta  o do tubo como meio filtrante de MP e potenciais aplica  es, apontam que os desdobramentos aqui apresentados, s  o potencialmente   teis para a delimita  o de um m  todo de teste em laborat  rio e campo (medidores equivalentes), como os baseados no princ  pio da microflu  idica.

Os estudos das estimativas de dispers  o e deposi  o de MP, como apresentado at   aqui, tem diversas caracter  sticas que devem ser levadas em considera  o, associadas   s medidas de campo, experimentais e at   mesmo em simula  es computacionais. Tais caracter  sticas, otimizam a aplica  o dos resultados encontrados para al  m dos estudos associados aos efeitos na sa  de e medi  o, ao atendimento a padr  es legais de qualidade do ar ou a pr  pria caracteriza  o do poluente.

REFERÊNCIAS

- Abramowitz, M. e Stegun, I. A. (1965). Handbook of mathematical functions with formulas, graphs, and mathematical table. Em *US Department of Commerce*. National Bureau of Standards Applied Mathematics series 55.
- Ali, B. e Omar, W. Z. W. (2015). Numerical solution of extended graetz problem by orthogonal collocation and crank-nicholson method. *American Journal of Heat and Mass Transfer*.
- Arfken, G. e Weber, H. H. (2007). *Física matemática: métodos matemáticos para engenharia e física*. Elsevier.
- Basmadjian, D. (1999). *The Art of Modeling in Science and Engineering with Mathematica*. CRC Press.
- Bateman, H. (1953). *Higher transcendental functions [volumes i-iii]*, volume 1. McGraw-Hill Book Company.
- Bejan, A. e Kraus, A. D. (2003). *Heat transfer handbook*, volume 1. John Wiley & Sons.
- Bennett, T. D. (2019). Correlations for the graetz problem in convection—part 1: For round pipes and parallel plates. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 136:832–841.
- Bhatti, M. e Shah, R. (1987). *Turbulent and transition flow convective heat transfer in ducts*. Wiley, New York.
- Bird, R. B. (2002). Transport phenomena. *Appl. Mech. Rev.*, 55(1):R1–R4.
- Bowen, B., Levine, S. e Epstein, N. (1976). Fine particle deposition in laminar flow through parallel-plate and cylindrical channels. *Journal of colloid and Interface science*, 54(3):375–390.
- BRASIL (2019). Saúde brasil 2018 uma análise de situação de saúde e das doenças e agravos crônicos: desafios e perspectivas. Relatório técnico, Ministério da Saúde, Secretaria de Vigilância em Saúde, Departamento de Vigilância de Doenças e Agravos Não Transmissíveis e Promoção da Saúde.
- Brown, G. M. (1960). Heat or mass transfer in a fluid in laminar flow in a circular or flat conduit. *AIChE Journal*, 6(2):179–183.
- Campo, A. (2020). Favorable asymptotic solutions of the graetz problem employing two dissimilar methods, each method engages three eigenvalues: Vestiges of history. *International Communications in Heat and Mass Transfer*, 119:104919.
- Carminati, M., Ferrari, G. e Sampietro, M. (2017). Emerging miniaturized technologies for airborne particulate matter pervasive monitoring. *Measurement*, 101:250 – 256.
- Chen, D.-R. e Pui, D. Y. (1995). Numerical and experimental studies of particle deposition in a tube with a conical contraction—laminar flow regime. *Journal of Aerosol Science*, 26(4):563–574.
- Chen, T., Sun, J., Ma, T., Li, T., Liu, C., Zhu, X. e Xue, N. (2019). Design and analysis of particulate matter air-microfluidic grading chip based on mems. *Micromachines*, 10(8):497.

- CONAMA (2018). Resolução n. 491, de 19 de novembro de 2018. *Ministério do Meio Ambiente/Conselho Nacional do Meio Ambiente*. Diário Oficial da União. Publicado em: 21/11/2018. Edição 223. Seção 1. p. 155.
- Crank, J. e Nicolson, P. (1947). A practical method for numerical evaluation of solutions of partial differential equations of the heat-conduction type. Em *Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society*, volume 43, páginas 50–67. Cambridge University Press.
- Dahneke, B. (1974). Diffusional deposition of particles. *Journal of Colloid and Interface Science*, 48(3):520–522.
- Fernandes, P. S. (2003). *Gestão de Fontes Estacionárias de Poluição Atmosférica*, capítulo: 3, páginas 181–285. Emissões atmosféricas.
- Flagan, R. C. e Seinfeld, J. H. (2012). *Fundamentals of air pollution engineering*. Courier Corporation.
- Fuchs, N. (1975). Sampling of aerosols. *Atmospheric Environment* (1967), 9(8):697 – 707.
- Ghiaasiaan, S. M. (2011). *Convective Heat and Mass Transfer*. Cambridge University Press.
- Graetz, L. (1882). Ueber die wärmeleitungsfähigkeit von flüssigkeiten. *Annalen der Physik*, 254(1):79–94.
- Greenberg, M. D. (1988). *Advanced engineering mathematics*. Prentice-Hall.
- Gulia, S., Prasad, P., Goyal, S. e Kumar, R. (2020). Sensor-based wireless air quality monitoring network (swaqmn) - a smart tool for urban air quality management. *Atmospheric Pollution Research*, 11(9):1588–1597.
- Johnston, P. (1994). A solution method for the graetz problem for non-newtonian fluids with dirichlet and neumann boundary conditions. *Mathematical and computer modelling*, 19(2):1–19.
- Kalberer, M. (2015). Aerosols | aerosol physics and chemistry. Em North, G. R., Pyle, J. e Zhang, F., editores, *Encyclopedia of Atmospheric Sciences (Second Edition)*, páginas 23 – 31. Academic Press, Oxford, second edition edition.
- Kreider, D. L. (1966). *An introduction to linear analysis*. Addison-Wesley.
- Lin, J.-S. e Tsai, C.-J. (2003). Thermophoretic deposition efficiency in a cylindrical tube taking into account developing flow at the entrance region. *Journal of Aerosol Science*, 34(5):569–583.
- McMurry, P. (2015). Aerosols | observations and measurements. Em North, G. R., Pyle, J. e Zhang, F., editores, *Encyclopedia of Atmospheric Sciences (Second Edition)*, páginas 53 – 65. Academic Press, Oxford, second edition edition.
- Micheli, Leonardo; Muller, M. (2017). An investigation of the key parameters for predicting pv soiling losses. *Progress in Photovoltaics: Research and Applications*, 25(4):291–307.
- Michelsen, M. e Villadsen, J. (1974). The graetz problem with axial heat conduction. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 17(11):1391–1402.
- Newman, J. (1969). The graetz problem.

- Nguyen, N.-T., Wereley, S. T. e Shaegh, S. A. M. (2019). *Fundamentals and applications of microfluidics*. Artech house.
- Notter, R. e Sleicher, C. (1972). A solution to the turbulent graetz problem—iii fully developed and entry region heat transfer rates. *Chemical Engineering Science*, 27(11):2073–2093.
- OMS (2006). *Air Quality Guidelines Global Update 2005: Particulate Matter, ozone, nitrogen dioxide and sulfur dioxide (A EURO Publication)*. Organização Mundial da Saúde.
- Patankar, S. e Spalding, D. (1983). Paper 5 - a calculation procedure for heat, mass and momentum transfer in three-dimensional parabolic flows. Em Patankar, S. V., Pollard, A., Singhal, A. K. e Vanka, S. P., editores, *Numerical Prediction of Flow, Heat Transfer, Turbulence and Combustion*, páginas 54–73. Pergamon.
- Philip, J. (1995). Deposition in narrow channels. *Chemical engineering science*, 50(5):793–802.
- Polyanin, A. D. e Zaitsev, V. F. (2002). *Handbook of exact solutions for ordinary differential equations*. CRC press.
- Rajaraman, P. e Heys, J. J. (2014). Simulation of nanoparticle transport in airways using petrov–galerkin finite element methods. *International journal for numerical methods in biomedical engineering*, 30(1):103–116.
- Rice, R. G. e Do, D. D. (1994). *Applied Mathematics and Modeling for Chemical Engineers (Wiley Series in Chemical Engineering)*. Wiley.
- Romay, F. J., Takagaki, S. S., Pui, D. Y. e Liu, B. Y. (1998). Thermophoretic deposition of aerosol particles in turbulent pipe flow. *Journal of Aerosol Science*, 29(8):943–959.
- Ruckenstein, E. e Prieve, D. C. (1973). Rate of deposition of brownian particles under the action of london and double-layer forces. *Journal of the Chemical Society, Faraday Transactions 2: Molecular and Chemical Physics*, 69:1522–1536.
- Ryzhkov, I. I. (2013). The extended graetz problem with specified heat flux for multicomponent fluids with soret and dufour effects. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 66:461–471.
- Saushin, I. e Goltsman, A. (2020). Uncertainty of isokinetic sampling of the phase composition of a gas-oil-water mixture at different regimes of a developed horizontal pipe flow. *Journal of Petroleum Science and Engineering*, 195:107901.
- Seinfeld, J. H. e Pandis, S. N. (2016). *Atmospheric chemistry and physics: from air pollution to climate change*. John Wiley & Sons.
- Sellars, J. R., Tribus, M. e Klein, J. (1954). Heat transfer to laminar flow in a round tube or flat conduit: the graetz problem extended. Relatório técnico.
- Socolofsky, S. A. e Jirka, G. H. (2005). Special topics in mixing and transport processes in the environment. *Engineering–Lectures. 5th Edition. Texas A&M University*, páginas 1–93.
- Spielman, L. A. e Friedlander, S. (1974). Role of the electrical double layer in particle deposition by convective diffusion. *Journal of Colloid and Interface Science*, 46(1):22–31.
- Stewart, J. (2013). Cálculo volume 2, tradução ez2 translate. São Paulo: Cengage Learning.

- Stull, R. B. et al. (2018). Practical meteorology: an algebra-based survey of atmospheric science.
- Tan, C. e Chia-Jung, H. (1970). Mass transfer of decaying products with axial diffusion in cylindrical tubes. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 13(12):1887–1905.
- Tan, Z. (2014). Air monitoring. Em *Air Pollution and Greenhouse Gases*, páginas 447–461. Springer.
- Thomas, L. H. (1949). Elliptic problems in linear difference equations over a network. *Watson Sci. Comput. Lab. Rept., Columbia University, New York*, 1.
- Tyree, C. e Allen, J. (2004). Diffusional particle loss upstream of isokinetic sampling inlets. *Aerosol science and technology*, 38(10):1019–1026.
- Vallero, D. A. (2008). 16 - ambient air sampling. Em VALLERO, D. A., editor, *Fundamentals of Air Pollution (Fourth Edition)*, páginas 457 – 471. Academic Press, Burlington, fourth edition edition.
- Walker, K. L., Homsy, G. M. e Geyling, F. T. (1979). Thermophoretic deposition of small particles in laminar tube flow. *Journal of Colloid and Interface science*, 69(1):138–147.
- Walsh, J. K., Weimer, A. e Hrenya, C. (2006). Thermophoretic deposition of aerosol particles in laminar tube flow with mixed convection. *Journal of aerosol science*, 37(6):715–734.
- Wang, N., Cai, M., Yang, X. e Yang, Y. (2018). Electret nanofibrous membrane with enhanced filtration performance and wearing comfortability for face mask. *Journal of Colloid and Interface Science*, 530:695–703.
- Wilcox, J. D. (1956). Isokinetic flow and sampling. *Journal of the Air Pollution Control Association*, 5(4):226–245.
- Wilks, D. S. (2006). *Statistical methods in the atmospheric sciences (International Geophysics Series; v. 91)*. Academic Press.
- Xie, Y., Guo, F., Mao, J., Huang, J., Chen, Z., Jiang, Y. e Lai, Y. (2021). Freestanding mos2@carbonized cellulose aerogel derived from waste cotton for sustainable and highly efficient particulate matter capturing. *Separation and Purification Technology*, 254:117571.
- Ye, Y. e Pui, D. Y. (1990). Particle deposition in a tube with an abrupt contraction. *Journal of aerosol science*, 21(1):29–40.
- Ysebaert, T., Koch, K., Samson, R. e Denys, S. (2021). Green walls for mitigating urban particulate matter pollution—a review. *Urban Forestry Urban Greening*, 59:127014.
- Zaitsev, V. F. e Polyanin, A. D. (2002). *Handbook of exact solutions for ordinary differential equations*. CRC press.
- Zheng, T., Bergin, M. H., Johnson, K. K., Tripathi, S. N., Shirodkar, S., Landis, M. S., Sutaria, R. e Carlson, D. E. (2018). Field evaluation of low-cost particulate matter sensors in high-and low-concentration environments. *Atmospheric Measurement Techniques*, 11(8):4823–4846.
- Zhu, C. (1999). 2 - isokinetic sampling and cascade samplers. Em Soo, S. L., editor, *Instrumentation for Fluid Particle Flow*, páginas 9 – 46. William Andrew Publishing, Park Ridge, NJ.

Zhu, R., Zhang, Y., Yuan, Y. e Li, S. (2018). Deposition loss of particles in the sampling lines of continuous emission monitoring system (CEMS) in coal-fired power plants. *Aerosol and Air Quality Research*, 18(6):1483–1492.

APÊNDICE A – MÉTODOS MATEMÁTICOS EMPREGADOS

Este apêndice contém uma revisão sucinta dos Método de Frobenius, das Funções hipergeométricas confluentes e o Problema de Sturm-Liouville objetivando o melhor entendimento das soluções apresentadas no capítulo 4 desta dissertação.

As descrições aqui apresentadas compõem uma base necessária para o entendimento das soluções de equações diferenciais que emergem da modelagem matemática do problema de estudo, de forma a otimizar o entendimento do equacionamento e resolução do problema de Graetz estendido. Definições completas, teoremas e demais explicações sobre tais teorias podem ser encontradas de forma bem detalhada nos livros textos de [Abramowitz e Stegun \(1965\)](#); [Bateman \(1953\)](#); [Zaitsev e Polyanin \(2002\)](#), textos estes, no qual esta seção foi baseada.

A.1 O MÉTODO DE FROBENIUS

No caso específico aqui proposto, a descrições a seguir partem da teoria que envolve equações diferenciais ordinárias de segunda ordem lineares e homogêneas. Sabe-se que a forma mais geral de uma equação diferencial ordinária, homogênea, linear e de segunda ordem é:

$$A(x)\frac{d^2y}{dx^2} + B(x)\frac{dy}{dx} + C(x)y = 0 \quad (\text{A.1})$$

Sendo $A(x)$, $B(x)$ e $C(x)$ funções analíticas nas vizinhanças de um ponto x_0 pertencente a um intervalo aberto. Se admitido que $A(x_0) \neq 0$, então este ponto é chamado ponto ordinário da equação diferencial. Caso contrário, se $A(x_0) = 0$, este é um ponto singular ([Bateman, 1953](#)).

Nesse sentido, diz-se que se os coeficientes da função $y = y(x)$ são analíticos em x_0 , é possível buscar uma solução analítica para y de modo que pode-se admitir uma expansão em série centrada em x_0 com raio de convergência $R_c > 0$, ou seja, uma série de potência em torno do ponto x_0 . Tal série é considerada convergente se ela aproximar-se de um valor finito, se n (o número de termos da série) tende ao infinito (aplicando-se o teste da razão, por exemplo, pode-se encontrar o raio de convergência). Deste modo, busca-se os valores de x que assegurem a convergência da série, com a_n sendo a constante da série expressa por:

$$y(x) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n (x - x_0)^n = a_0 + a_1 (x - x_0) + \cdots + a_n (x - x_0)^n + \cdots, \quad \forall |x - x_0| < R_c \quad (\text{A.2})$$

Um método bem útil nestes casos, para encontrar essa série, é o método de Frobenius. Tal método é aplicável quando a singularidade é regular, como no caso problema proposto e o único caso a ser discutido neste trabalho. Neste sentido, admitindo-se $M(x) = \frac{B(x)}{A(x)}$ e $N(x) = \frac{C(x)}{A(x)}$, analíticas em x_0 e que o $\lim_{x \rightarrow x_0} (x - x_0)M(x)$ e o $\lim_{x \rightarrow x_0} (x - x_0)^2 N(x)$ existam, então o ponto singular x_0 será um ponto singular regular. Logo, é possível obter-se a equação:

$$\frac{d^2y}{dx^2} + M(x)\frac{dy}{dx} + N(x)y = 0 \quad (\text{A.3})$$

Para o caso geral, na equação A.3 e considerando as soluções para o caso da singularidade regular em $x_0 = 0$, aplica-se as expansões:

$$y = \sum_{n=0}^{\infty} a_n x^{n+j} \quad (\text{A.4})$$

$$\frac{dy}{dx} = \sum_{n=0}^{\infty} a_n (n+j) x^{n+j-1} \quad (\text{A.5})$$

$$\frac{d^2y}{dx^2} = \sum_{n=0}^{\infty} a_n (n+j-1)(n+j) x^{n+j-2} \quad (\text{A.6})$$

Nelas, j é um índice variável (a ser determinado) e $a_0 \neq 0$, já as equação A.5 e A.6, são as derivadas de primeira e segunda ordem da expansão dadas pela equação A.4 e são aplicadas na resolução do problema pelo método de Frobenius.

A primeira etapa da análise é encontrar o valor adequado para os parâmetros da relação indicial substituindo as equação A.4, A.5 e A.6 na equação A.3 e inspecionando o coeficientes da menor potência de x . Nessa etapa deve-se ter atenção à possibilidade da existência de mais de um valor para o índice variável. Após esta etapa, busca-se encontrar a relação de recorrência "removendo-se" progressivamente o menor coeficiente que multiplica uma potência comum em x , e repetindo esta etapa fazendo $n = n + 1$ até que seja assim possível encontrar a série resultante, dada pela relação de recorrência encontrada.

Tais passos podem ser detalhadamente encontrados em livros texto, como Rice e Do (1994). Além disso, esses passos são detalhadamente executados no apêndice B.3, para o caso da equação aqui estudada.

Para Arfken e Weber (2007) a aceitabilidade da solução encontrada por este método depende de sua convergência (incluindo sua convergência assintótica). O autor comenta que é possível que o método de Frobenius forneça uma solução de série que satisfaça a equação diferencial original quando substituída na equação, mas que não convirja na região de interesse. O que é discutido no capítulo 6.

A.2 FUNÇÕES HIPERGEOMÉTRICAS CONFLUENTES

Nesta seção apresenta-se uma classe de equações especiais, a das equações hipergeométricas, cujas soluções são chamadas de funções hipergeométricas. Existem funções especiais, casos particulares das funções hipergeométricas, e alguns exemplos são as funções de: Bessel, Legendre, Jacobi dentre outras (Bateman, 1953; Zaitsev e Polyanin, 2002).

As funções hipergeométricas são agrupadas em matemática num grupo de funções especiais que podem ser representadas por séries hipergeométricas. Para Bateman (1953) se uma equação diferencial linear homogênea de segunda ordem tem no máximo três singularidades, pode-se assumir que estas singularidades estão em 0, ∞ e 1. Se estas estas singularidades são "regulares", então a equação pode ser reduzido à forma de ($y = y(x)$):

$$x(1-x) \frac{d^2y}{dx^2} + [c - (a+b+1)x] \frac{dy}{dx} - aby = 0 \quad (\text{A.7})$$

sendo que na equação A.7 a , b e c , são parâmetros reais ou complexos arbitrários. Se forem consideradas as soluções para o caso da singularidade em $x_0 = 0$ e admitindo uma solução na forma de uma série de potências, tal como, a equação A.4 pode-se aplicar o método de Frobenius.

Resolvendo essa equação algébrica temos dois valores para o índice $j = 0$ e $j = 1 - c$ que resulta em duas soluções. Neste caso se $y_1(x)$ e $y_2(x)$ são linearmente independentes, então a combinação linear das duas também é solução:

$$y(x) = Ay_1(x) + By_2(x) \quad (\text{A.8})$$

onde:

$$y_1(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(a)_n \cdot (b)_n}{n! \cdot (c)_n} x^n \quad (\text{A.9})$$

$$y_2(x) = x^{1-c} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(1+a-c)_n \cdot (1+b-c)_n}{n! \cdot (2-c)_n} x^n \quad (\text{A.10})$$

Sendo que na equação A.8, A e B são duas constantes arbitrárias (determinadas pelas condições particulares do problema), $a_0 = 1$ (sem perda de generalidade) e a notação usada em A.9 e A.10 é o chamado símbolo de Pochhammer, aplicável a $(a)_n$, $(b)_n$, $(c)_n$ (Bateman, 1953; Zaitsev e Polyanin, 2002):

$$\begin{aligned} (a)_0 &= 1 \\ (a)_n &= a(1+a)(2+a)\dots(a+n-1) \quad \text{para } n = 1, 2, 3, \dots \end{aligned}$$

Por um conveniente processo de limite, ou seja, a confluência de duas singularidades na equação diferencial hipergeométrica, é introduzido agora a equação hipergeométrica confluyente cujas soluções são as funções hipergeométricas confluentes. A partir do qual as representações da solução geral do problema proposto também é analisado. Para obtenção desta nova equação aplica-se uma mudança de variável $u = bx$ na equação A.7, logo:

$$u \left(1 - \frac{u}{b} \right) \frac{d^2 y}{du^2} + \left[c - \left(\frac{a+1}{b} + 1 \right) u \right] \frac{dy}{du} - ay = 0 \quad (\text{A.11})$$

Tomando o limite $b \rightarrow \infty$ na equação A.11, tem-se que:

$$u \frac{d^2 y}{du^2} + (c - u) \frac{dy}{du} - ay = 0 \quad (\text{A.12})$$

Sua análise retorna dois pontos singulares, $u = 0$ que é ponto singular regular e $u = \infty$ que é singular irregular. Como feito anteriormente aplicando-se o Método de Frobenius tem-se que as raízes indiciais para A.12 são $j = 0$ e $j = 1 - c$. resultando nas duas soluções:

$$u_1(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(a)_n}{n! (c)_n} x^n \quad (\text{A.13})$$

$$u_2(x) = x^{1-c} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(1+a-c)_n}{n! (2-c)_n} x^n \quad (\text{A.14})$$

As equação A.13 e A.14 são conhecidas como funções hipergeométricas confluentes do primeiro e segundo tipo, respectivamente. As implicações e demonstrações dessa informações são amplamente difundidas na literatura e podem ser encontradas em Bateman (1953); Zaitsev e Polyanin (2002), sendo a equação A.12 conhecida também como Equação de Kummer. Neste caso, por simplificação, adota-se no capítulo de modelagem a notação $M(a, c, x)$ para a função

do primeiro tipo e $U(1 + a - c, 2 - c, x)$ para a função do segundo tipo, logo a solução geral pode ser expressa por (onde A' e B' são constantes arbitrárias):

$$u(x) = A'M(a, c, x) + B'x^{1-c}U(1 + a - c, 2 - c, x) \quad (\text{A.15})$$

No capítulo 4 são apresentados duas transformações de variáveis distintas de modo a se obter a solução geral do problema.

A.3 PROBLEMA DE STURM-LIOUVILLE

Por fim, apresenta-se nesta seção uma descrição sucinta do Sistema de Sturm-Liouville que é uma ferramenta útil para dedução analítica do problema de estudo. Sabe-se que uma equação de Sturm-Liouville e suas condições de contorno podem ser escritas, respectivamente, por:

$$\frac{d}{dx} \left[P(x) \frac{dy}{dx} \right] + Q(x)y(x) + \sigma S(x)y(x) = 0 \quad (\text{A.16})$$

$$\begin{aligned} \Gamma y(a) + \xi \frac{dy(a)}{dx} &= 0 \\ \gamma y(b) + \delta \frac{dy(b)}{dx} &= 0 \end{aligned} \quad (\text{A.17})$$

O problema é analisado no intervalo $[a, b]$, com $P(x) > 0$ e $S(x) > 0$ e onde o σ é um parâmetro independente de x e $y(x)$. Além disso, $\Gamma, \xi, \gamma, \delta$ são números reais que constituem um sistema de Sturm-Liouville. Isso na verdade é um problema de autovalor-autovetor, ou autovalor-autofunção, com \mathcal{L} sendo denominado como o operador de Sturm-Liouville, dado por:

$$\begin{aligned} \mathcal{L}y &= \lambda y \\ \text{com} \\ \mathcal{L} &\equiv -\frac{1}{S(x)} \left[\frac{d}{dx} \left(P(x) \frac{d}{dx} \right) + Q(x) \right] \end{aligned} \quad (\text{A.18})$$

Deste modo pelo Teorema de Sturm-Liouville o problema de autovalor-autofunção possui uma sequência de autovalores σ_n e autofunções ϕ_n com $n \in \mathbb{N}$ (conjunto dos números naturais) com as seguintes propriedades:

1. $\sigma_n \in \mathbb{R}$ (conjunto dos números reais); existe um único σ_n para cada ϕ_n ;
2. $\sigma_1 < \sigma_2 < \dots; \lim_{n \rightarrow \infty} \sigma_n = \infty$;
3. $param \neq n \Rightarrow \langle \phi_m, \phi_n \rangle = 0$, sendo que a simbologia \langle , \rangle representa o produto interno

(A.19)

$$\langle f, g \rangle \equiv \int_a^b f^*(x)g(x)S(x)dx \quad (\text{A.20})$$

Assim para qualquer função $y(x)$ os ϕ_n 's proporcionam uma série de Fourier conforme a equação A.21.

$$y(x) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n \phi_n(x), \quad a_n = \frac{\langle y, \phi_n \rangle}{\langle \phi_n, \phi_n \rangle} \quad (\text{A.21})$$

APÊNDICE B – DETALHAMENTO DOS MÉTODOS PARA OBTENÇÃO DA SOLUÇÃO ANALÍTICA

B.1 MUDANÇA DE COORDENADAS

Conforme [Stewart \(2013\)](#) no sistema de coordenadas cilíndricas um ponto P no espaço tridimensional é representado pela tripla ordenada (r, θ, z) , onde r e θ são as coordenadas polares da projeção de P no plano xy e z é a distância orientada do plano xy a P .

Para convertermos de coordenadas cilíndricas para retangulares, usa-se a relação:

$$x = r \cos \theta, \quad y = r \sin \theta, \quad z = z \quad (\text{B.1})$$

Já para se converter de coordenadas retangulares para cilíndricas, usa-se a relação:

$$r^2 = x^2 + y^2, \quad \tan \theta = \frac{y}{x}, \quad z = z \quad (\text{B.2})$$

Para realizar a mudança de coordenadas, utiliza-se o determinante chamado Jacobiano da transformação. O jacobiano \mathbf{J} de x, y, z em relação as novas variáveis r, θ, z para o sistema é dado pelo determinante da matriz das derivadas. Deste modo, usando-se as relações [B.1](#) é possível obter o jacobiano \mathbf{J} , dado por:

$$\mathbf{J} = \frac{\partial(x, y, z)}{\partial(r, \theta, z)} = \det \begin{bmatrix} \frac{\partial x}{\partial r} & \frac{\partial x}{\partial \theta} & \frac{\partial x}{\partial z} \\ \frac{\partial y}{\partial r} & \frac{\partial y}{\partial \theta} & \frac{\partial y}{\partial z} \\ \frac{\partial z}{\partial r} & \frac{\partial z}{\partial \theta} & \frac{\partial z}{\partial z} \end{bmatrix} = \begin{vmatrix} \cos \theta & -r \sin \theta & 0 \\ \sin \theta & r \cos \theta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{vmatrix} = r \quad (\text{B.3})$$

Partindo-se da regra de Cramer, como apresentado por [Greenberg \(1988\)](#), tem-se que em um sistema linear $\mathbf{Ax} = \mathbf{c}$ onde \mathbf{A} é uma matriz inversível, cada componente de \mathbf{x} pode ser calculado pela razão dos dois determinantes. Nesta razão o denominador é o determinante da matriz \mathbf{A} e o numerador também é o determinante da matriz \mathbf{A} mas com a i -ésima coluna substituída por \mathbf{c} .

$$\begin{aligned} f &= x(r, \theta) = x - r \cos \theta = 0 \\ g &= y(r, \theta) = y - r \sin \theta = 0 \end{aligned} \quad (\text{B.4})$$

$$r_x = -\frac{\frac{\partial(f,g)}{\partial(x,\theta)}}{\frac{\partial(f,g)}{\partial(r,\theta)}}, \quad r_y = -\frac{\frac{\partial(f,g)}{\partial(y,\theta)}}{\frac{\partial(f,g)}{\partial(r,\theta)}}, \quad \theta_x = -\frac{\frac{\partial(f,g)}{\partial(r,x)}}{\frac{\partial(f,g)}{\partial(r,\theta)}}, \quad \theta_y = -\frac{\frac{\partial(f,g)}{\partial(r,y)}}{\frac{\partial(f,g)}{\partial(r,\theta)}} \quad (\text{B.5})$$

Deste modo tem-se as relações para as derivadas parciais dados por [B.5](#)¹ obtidas utilizando-se as relações [B.4](#)².

$$r_x = -\frac{\begin{vmatrix} f_x & f_\theta \\ g_x & g_\theta \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} f_r & f_\theta \\ g_r & f_\theta \end{vmatrix}} = -\frac{\begin{vmatrix} 1 & r \sin \theta \\ 0 & -r \cos \theta \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} -\cos \theta & r \sin \theta \\ -\sin \theta & -r \cos \theta \end{vmatrix}} = \cos \theta \quad (\text{B.6})$$

¹Pro simplificação, como $z = z$ na mudança de variáveis é possível simplificar da matriz 3x3 original dada por [B.3](#) para uma matriz 2x2

²A notação r_x é uma simplificação da relação $\frac{\partial r}{\partial x}$ (analogamente para r_y , θ_x e θ_y e demais relações neste formato)

$$r_y = - \frac{\begin{vmatrix} f_y & f_\theta \\ g_y & g_\theta \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} f_r & f_\theta \\ g_r & g_\theta \end{vmatrix}} = - \frac{\begin{vmatrix} 0 & r \sin \theta \\ 1 & -r \cos \theta \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} -\cos \theta & r \sin \theta \\ -\sin \theta & -r \cos \theta \end{vmatrix}} = \sin \theta \quad (\text{B.7})$$

$$\theta_x = - \frac{\begin{vmatrix} f_r & f_x \\ g_r & g_x \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} f_r & f_\theta \\ g_r & g_\theta \end{vmatrix}} = - \frac{\begin{vmatrix} -\cos \theta & 1 \\ -\sin \theta & 0 \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} -\cos \theta & r \sin \theta \\ -\sin \theta & -r \cos \theta \end{vmatrix}} = - \frac{\sin \theta}{r} \quad (\text{B.8})$$

$$\theta_y = - \frac{\begin{vmatrix} f_r & f_y \\ g_r & g_y \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} f_r & f_\theta \\ g_r & g_\theta \end{vmatrix}} = - \frac{\begin{vmatrix} -\cos \theta & 0 \\ -\sin \theta & 1 \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} -\cos \theta & r \sin \theta \\ -\sin \theta & -r \cos \theta \end{vmatrix}} = \frac{\cos \theta}{r} \quad (\text{B.9})$$

Assim, efetuando-se as derivadas apresentadas nas relações B.5 tem-se o resultados apresentados em pelas seguintes identidades B.6, B.7, B.8 e B.9, como apresentado por Greenberg (1988), resumidamente dadas por:

$$r_x = \cos \theta, \quad \theta_x = -\frac{\sin \theta}{r}, \quad r_y = \sin \theta, \quad \theta_y = \frac{\cos \theta}{r} \quad (\text{B.10})$$

Usando os resultados apresentados pelas relações B.10 e usando a regra da cadeia de múltiplas variáveis para um função arbitrária, aqui definida por $\psi = \psi(r(x, y), \theta(x, y))$, tem-se as equações da derivada primeira, dada por:

$$\frac{\partial \psi}{\partial x} = \frac{\partial \psi}{\partial r} \frac{\partial r}{\partial x} + \frac{\partial \psi}{\partial \theta} \frac{\partial \theta}{\partial x} = \cos \theta \frac{\partial \psi}{\partial r} - \frac{\sin \theta}{r} \frac{\partial \psi}{\partial \theta} \quad (\text{B.11})$$

$$\frac{\partial \psi}{\partial y} = \frac{\partial \psi}{\partial r} \frac{\partial r}{\partial y} + \frac{\partial \psi}{\partial \theta} \frac{\partial \theta}{\partial y} = \sin \theta \frac{\partial \psi}{\partial r} + \frac{\cos \theta}{r} \frac{\partial \psi}{\partial \theta} \quad (\text{B.12})$$

Com base nas equações B.11 e B.12 e derivando-se novamente, tem-se as equações da derivada segunda, dada por:

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = \cos \theta \frac{\partial}{\partial r} \left[\cos \theta \frac{\partial \psi}{\partial r} - \frac{\sin \theta}{r} \frac{\partial \psi}{\partial \theta} \right] - \frac{\sin \theta}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} \left[\cos \theta \frac{\partial \psi}{\partial r} - \frac{\sin \theta}{r} \frac{\partial \psi}{\partial \theta} \right] \quad (\text{B.13})$$

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} = \sin \theta \frac{\partial}{\partial r} \left[\sin \theta \frac{\partial \psi}{\partial r} + \frac{\cos \theta}{r} \frac{\partial \psi}{\partial \theta} \right] + \frac{\cos \theta}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} \left[\sin \theta \frac{\partial \psi}{\partial r} + \frac{\cos \theta}{r} \frac{\partial \psi}{\partial \theta} \right] \quad (\text{B.14})$$

Somando-se as equações B.13 e B.14 e sabendo que $\sin^2 + \cos^2 = 1$ tem-se a equação³:

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} = \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \theta^2} \quad (\text{B.15})$$

B.2 MÉTODO DE SEPARAÇÃO DE VARIÁVEIS APLICADO A SOLUÇÃO DO PROBLEMA

O método sugere que $\tilde{C}(\tilde{Y}, \tilde{Z})$ pode ser escrita como o produto dado por $\zeta(\tilde{Z})\beta(\tilde{Y})$.

$$\frac{d\tilde{C}}{d\tilde{Z}} = \frac{\partial \zeta}{\partial \tilde{Z}} \beta, \quad \frac{d\tilde{C}}{d\tilde{Y}} = \frac{\partial \beta}{\partial \tilde{Y}} \zeta \quad (\text{B.16})$$

$$(1 - \tilde{Y}^2) \frac{d\zeta}{d\tilde{Z}} \beta = \frac{1}{\tilde{Y}} \zeta \frac{d}{d\tilde{Y}} \left(\tilde{Y} \frac{d\beta}{d\tilde{Y}} \right) \quad (\text{B.17})$$

Usando as relações apresentadas em B.16 e substituindo em 4.10, tem-se a equação B.17. Ajustando os termos da equação B.17 e usando a constante de separação ela fica conforme:

$$\frac{1}{\zeta} \frac{d\zeta}{d\tilde{Z}} = \frac{1}{\beta(1 - \tilde{Y}^2)} \frac{1}{\tilde{Y}} \frac{d}{d\tilde{Y}} \left(\tilde{Y} \frac{d\beta}{d\tilde{Y}} \right) = -\lambda^2 \quad (\text{B.18})$$

Sendo que as duas equações resultantes, na equação B.18, podem ser reajustadas para:

$$\frac{d\zeta}{d\tilde{Z}} + \lambda^2 \zeta = 0 \quad (\text{B.19})$$

$$\frac{d}{d\tilde{Y}} \left(\tilde{Y} \frac{d\beta}{d\tilde{Y}} \right) + \lambda^2 (1 - \tilde{Y}^2) \tilde{Y} \beta = 0 \quad (\text{B.20})$$

B.3 MÉTODO DE FROBENIUS APLICADO A SOLUÇÃO DO PROBLEMA

Identificado que a equação geral do problema é um problema de Sturm-Liouville pode-se aplicar o método de Frobenius para se obter a solução do problema. Aqui, a equação 4.13 pode ser reescrita na forma de (Para facilitar a aplicação do método, usa-se a uma mudança de notação, fazendo $\beta(\tilde{Y}) = y(x)$):

$$x \frac{d^2 y}{dx^2} + \frac{dy}{dx} + \lambda^2 x (1 - x^2) y = 0 \quad (\text{B.21})$$

Desde modo, usando as relações da solução geral dado o método de Frobenius (A.4, A.5 e A.6) é possível obter a equação:

$$x \sum_{n=0}^{\infty} a_n (n+j)(n+j-1) x^{n+j-2} + \sum_{n=0}^{\infty} a_n (n+j) x^{n+j-1} + \lambda^2 x (1 - x^2) \sum_{n=0}^{\infty} a_n x^{n+j} = 0 \quad (\text{B.22})$$

³Onde: $\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) \equiv \frac{\partial^2 \psi}{\partial r^2} + \frac{1}{r} \frac{\partial \psi}{\partial r}$

Essa equação pode ser simplificada e reescrita, fazendo-se o produto em cada termo do x e respectivo expoente com seu somatório associado, como a equação:

$$\sum_{n=0}^{\infty} a_n(n+j)(n+j-1)x^{n+j-1} + \sum_{n=0}^{\infty} a_n(n+j)x^{n+j-1} + \lambda^2 \sum_{n=0}^{\infty} a_n x^{n+j+1} - \lambda^2 \sum_{n=0}^{\infty} a_n x^{n+j+3} = 0 \quad (\text{B.23})$$

Removendo-se o menor coeficiente, x^{n+j-1} do somatório e fazendo $n = 0$ para o termo de menor coeficiente, tem-se:

$$a_0[(j)(j-1) + (j)]x^{j-1} = 0 \quad (\text{B.24})$$

Pra que atenda a premissa que $a_0 \neq 0$ a remoção de x^{n+j-1} só é possível se $[(j)(j-1) + (j)] = 0$, o que implica de $j = 0$. O termo j é denominado raiz indicial, e que neste caso só se consegue uma única solução na forma de uma série de potência, logo, $j = 0$ é igual ao único valor da raiz indicial e fornece uma única solução para a equação diferencial.

Agora incrementando e fazendo $n = n + 1$ em B.23, tem-se a equação:

$$\sum_{n=0}^{\infty} a_{n+1}(n+j+1)(n+j)x^{n+j} + \sum_{n=0}^{\infty} a_{n+1}(n+j+1)x^{n+j} + \lambda^2 \sum_{n=0}^{\infty} a_n x^{n+j+1} - \lambda^2 \sum_{n=0}^{\infty} a_n x^{n+j+3} = 0 \quad (\text{B.25})$$

Isso ainda não permite encontrar uma relação de recorrência, então executa-se novamente a remoção do menor coeficiente, x^{n+j} do somatório e fazendo $n = 0$ para o termo de menor coeficiente, tem-se:

$$a_1[(j+1)(j) + (j+1)]x^j = 0 \quad (\text{B.26})$$

Claramente usando-se $j = 0$, que foi obtido no passo anterior, a relação para a remoção de x^{n+j} só é possível se $a_1 = 0$ uma vez $[(j+1)(j) + (j+1)] \neq 0$ com $j = 0$. Isto implica que todos os termos ímpares são nulos, ou seja, $a_3 = a_5 = \dots = 0$ (isso pode ser garantido se expandindo a série para tais termos e verifica-se a validade de tal argumento).

Agora incrementando novamente e fazendo $n = n + 1$ em B.25, tem-se a equação:

$$\sum_{n=0}^{\infty} a_{n+2}(n+j+2)(n+j+1)x^{n+j+1} + \sum_{n=0}^{\infty} a_{n+2}(n+j+2)x^{n+j+1} + \lambda^2 \sum_{n=0}^{\infty} a_n x^{n+j+1} - \lambda^2 \sum_{n=0}^{\infty} a_n x^{n+j+3} = 0 \quad (\text{B.27})$$

Isso ainda não permite encontrar uma relação de recorrência, então executa-se novamente a remoção do menor coeficiente, x^{n+j+1} do somatório e fazendo $n = 0$ para o termo de menor coeficiente, tem-se:

$$[a_2[(j+2)(j+1) + (j+2)] + a_0\lambda^2]x^{j+1} = 0 \quad (\text{B.28})$$

Claramente usando-se $j = 0$, que foi obtido no passo para obter $a_0 \neq 0$, a relação para a remoção de x^{n+j+1} só é possível se $4a_2 + \lambda^2 a_0 = 0$ o que implica que $\frac{a_2}{a_0} = -\frac{\lambda^2}{4}$.

Isso permite encontrar uma relação de recorrência envolvendo a_0 , mas para garantir que esta relação seja válida para todos os termos é necessário continuar a expansão da série até o termo de maior coeficiente, deste modo garantindo a relação de recorrência encontrada.

Assim, incrementando novamente e fazendo $n = n + 1$ em B.27, tem-se a equação:

$$\sum_{n=0}^{\infty} a_{n+3}(n+j+3)(n+j+2)x^{n+j+2} + \sum_{n=0}^{\infty} a_{n+3}(n+j+3)x^{n+j+2} + \lambda^2 \sum_{n=0}^{\infty} a_{n+1} x^{n+j+2} - \lambda^2 \sum_{n=0}^{\infty} a_n x^{n+j+3} = 0 \quad (\text{B.29})$$

Isso ainda não permite encontrar uma relação de recorrência, então executa-se novamente a remoção do menor coeficiente, x^{n+j+2} do somatório e fazendo $n = 0$ para o termo de menor coeficiente, tem-se:

$$a_3[(j+3)(j+3) + (j+3) + a_1\lambda^2]x^{j+2} = 0 \quad (\text{B.30})$$

Claramente usando-se $j = 0$, que foi obtido no passo para obter $a_0 \neq 0$, a relação para a remoção de x^{n+j+2} só é possível se $9a_3 + \lambda^2 a_1 = 0$ o que implica que $\frac{a_3}{a_1} = \frac{-\lambda^2}{9}$. Como $a_1 = 0$ então tem-se que $a_3 = 0$, como já descrito.

Agora incrementando novamente e fazendo $n = n + 1$ em B.29, tem-se a equação:

$$\sum_{n=0}^{\infty} a_{n+4}[(n+j+4)(n+j+3) + (n+j+4)]x^{n+j+3} + \lambda^2 \sum_{n=0}^{\infty} a_{n+2}x^{n+j+3} - \lambda^2 \sum_{n=0}^{\infty} a_n x^{n+j+3} = 0 \quad (\text{B.31})$$

Isso permite encontrar uma relação de recorrência dado que todos os coeficientes estão multiplicando o termo, x^{n+j+3} do somatório. Agora fazendo $n = 0$ para o termo de menor coeficiente, tem-se:

$$[a_4[(j+4)(j+3) + (j+4)] + a_2\lambda^2 - a_0\lambda^2]x^{j+4} = 0 \quad (\text{B.32})$$

Claramente usando-se $j = 0$, que foi obtido no passo para obter $a_0 \neq 0$, a relação para a remoção de x^{n+j+3} só é possível se $16a_4 + \lambda^2 a_2 - \lambda^2 a_0 = 0$ o que implica que $\frac{a_4}{a_2 - a_0} = \frac{-\lambda^2}{16}$. Como $a_2 = \frac{-\lambda^2}{4}a_0$ é possível obter a_4 em função de a_0 .

Deste modo é possível obter, usando $j = 0$, os coeficientes iniciais da função que é solução geral da equação 4.13, que são dados por:

$$a_0 \neq 0, \quad a_1 = a_3 = 0, \quad a_2 = \frac{-\lambda^2}{4}a_0, \quad a_4 = \left(\frac{-\lambda^2}{16}\right)\left(\frac{-\lambda^2}{4}a_0 - a_0\right) = a_0\left(\frac{\lambda^2}{16}\right)\left(1 + \frac{\lambda^2}{4}\right) \quad (\text{B.33})$$

A solução geral pode ser escrita, fazendo $n = 2k$ dado que os coeficientes ímpares são nulos, no formado da equação:

$$y(x) = \sum_{k=0}^{\infty} a_{2k}x^{2k} \quad (\text{B.34})$$

A série resultante, considerando que $y(x) = G_Z(x, \lambda)$ tem todos os seus termos definidos em função de a_0 e, além disso, é obtida somando-se os termos iniciais e multiplicando por x^{2k} . Essa série pode ser descrita como:

$$G_Z(x, \lambda) = a_0 \left[1 - \left(\frac{\lambda^2}{4}\right)x^2 + \frac{\lambda^2}{16} \left(1 + \frac{\lambda^2}{4}\right)x^4 + \dots \right] \quad (\text{B.35})$$

Voltando para as variáveis iniciais, pode-se reescrever a equação B.34, sendo $\beta(\tilde{Y}) = y(x)$ e $x^{2k} = \tilde{Y}^{2k}$, na forma da equação:

$$\beta(\tilde{Y}) = \sum_{k=2}^{\infty} \frac{\lambda^2}{(2k)^2} (a_{2(k-2)} - a_{2(k-1)}) \tilde{Y}^{2k} \quad (\text{B.36})$$

Valida para $k \geq 2$, obtida de $(2k)^2 a_{2k} + \lambda^2 a_{2(k-1)} - \lambda^2 a_{2(k-2)} = 0$ que pode ser rescrito na forma de:

$$a_{2k} = \frac{\lambda^2}{(2k)^2} (a_{2(k-2)} - a_{2(k-1)})^4 \quad (\text{B.37})$$

É importante ressaltar que o termo a_0 pode ser escolhido arbitrariamente, com a única restrição que $a_0 \neq 0$. Logo, tem-se que é arbitrado $a_0 = 1$ sem perda de generalidade.

É possível notar que a série B.35 pode também ser reescrita na forma de:

$$G_Z(x, \lambda) = a_0 \left[1 - \left(\frac{1}{4} \right) (\lambda x)^2 + \frac{1}{16} \left(\frac{1}{\lambda^2} + \frac{1}{4} \right) (\lambda x)^4 + \dots \right] \quad (\text{B.38})$$

Consequentemente B.36 pode ser vista também sobre a forma da equação:

$$\beta(\tilde{Y}) = \sum_{k=2}^{\infty} \frac{1}{(2k)^2} (a_{2(k-2)} - a_{2(k-1)}) (\lambda \tilde{Y})^{2k} \quad (\text{B.39})$$

B.4 MUDANÇA DE VARIÁVEL PARA FUNÇÃO DE WHITTAKER

A equação 4.13 pode ser reescrita na forma de (Para facilitar a aplicação do método, usa-se a uma mudança de notação, fazendo $\beta(\tilde{Y}) = y(x)$:

$$x \frac{d^2 y}{dx^2} + \frac{dy}{dx} + \lambda^2 x (1 - x^2) y = 0 \quad (\text{B.40})$$

Aplicando na equação B.40 uma transformação de variáveis, onde $\chi = \lambda x^2$ e $\psi = xy$, tem-se:

$$x \frac{d}{dx} \left(\frac{d}{dx} \left(\frac{\psi}{x} \right) \right) + \frac{d}{dx} \left(\frac{\psi}{x} \right) + \lambda^2 x (1 - x^2) \frac{\psi}{x} = 0 \quad (\text{B.41})$$

onde:

$$\frac{d}{dx} \left(\frac{\psi}{x} \right) = -x^{-2} \psi + x^{-1} \frac{d\psi}{dx} = \frac{1}{x} \frac{d\psi}{dx} - \frac{1}{x^2} \psi \quad (\text{B.42})$$

$$\frac{d}{dx} \left(\frac{d}{dx} \left(\frac{\psi}{x} \right) \right) = \frac{d}{dx} \left(\frac{1}{x} \frac{d\psi}{dx} - \frac{1}{x^2} \psi \right) = \frac{2}{x^3} \psi - \frac{2}{x^2} \frac{d\psi}{dx} + \frac{1}{x} \frac{d^2 \psi}{dx^2} \quad (\text{B.43})$$

Substituindo B.42 e B.43 em B.41, tem-se:

$$\frac{2}{x^2} \psi - \frac{2}{x} \frac{d\psi}{dx} + \frac{d^2 \psi}{dx^2} + \frac{1}{x} \frac{d\psi}{dx} - \frac{1}{x^2} \psi + \lambda^2 (1 - x^2) \psi = \frac{d^2 \psi}{dx^2} - \frac{1}{x} \frac{d\psi}{dx} + \left(\frac{1}{x^2} + \lambda^2 (1 - x^2) \right) \psi = 0 \quad (\text{B.44})$$

Pela regra da cadeia, tem-se que B.44 pode ser reescrita como:

$$\frac{d}{dx} \left((2x\lambda) \frac{d\psi}{d\chi} \right) - (2\lambda) \frac{d\psi}{d\chi} + \left(\frac{1}{x^2} + \lambda^2 - \lambda^2 x^2 \right) \psi = (2x\lambda)^2 \frac{d^2 \psi}{d\chi^2} + \left(\frac{1}{x^2} + \lambda^2 - \lambda^2 x^2 \right) \psi = 0 \quad (\text{B.45})$$

⁴Cabe-se salientar que a_{2k} é uma relação de recorrência que depende dos dois primeiros termos, por isso o somatório é dado a partir do termo $k = 2$.

Logo, sendo $\chi = \lambda x^2$, a equação B.45 pode ser reescrita como:

$$4\lambda\chi \frac{d^2\psi}{d\chi^2} + \left(\frac{\lambda}{\chi} + \lambda^2 - \lambda\chi\right)\psi = \frac{d^2\psi}{d\chi^2} + \left(\frac{1}{4\chi^2} + \frac{\lambda}{4\chi} - \frac{1}{4}\right)\psi = 0 \quad (\text{B.46})$$

Sendo esta equação B.46 aplicada na seção 4.1.3 como a função de Whittaker.

B.5 CÁLCULO DO COEFICIENTE A_N

Considerando inicialmente que β_n e β_m são autofunções da solução da equação diferencial expressa em 4.13, respectivamente expressas pelas equações:

$$\frac{d}{d\tilde{Y}} \left(\tilde{Y} \frac{d\beta_n}{d\tilde{Y}} \right) + \lambda_n^2 (1 - \tilde{Y}^2) \tilde{Y} \beta_n = 0 \quad (\text{B.47})$$

$$\frac{d}{d\tilde{Y}} \left(\tilde{Y} \frac{d\beta_m}{d\tilde{Y}} \right) + \lambda_m^2 (1 - \tilde{Y}^2) \tilde{Y} \beta_m = 0 \quad (\text{B.48})$$

é necessário verificar que para $m \neq n$ o produto interno obtido por A.20 é nulo.

Multiplicando B.47 por β_m e B.48 por β_n e $w(\tilde{Y})$ tem-se as relações expressas, respectivamente, pelas equações:

$$\beta_m \frac{d}{d\tilde{Y}} \left(\tilde{Y} \frac{d\beta_n}{d\tilde{Y}} \right) + \lambda_n^2 (1 - \tilde{Y}^2) \tilde{Y} \beta_n \beta_m = 0 \quad (\text{B.49})$$

$$\beta_n \frac{d}{d\tilde{Y}} \left(\tilde{Y} \frac{d\beta_m}{d\tilde{Y}} \right) + \lambda_m^2 (1 - \tilde{Y}^2) \tilde{Y} \beta_n \beta_m = 0 \quad (\text{B.50})$$

Nota-se que B.49 e B.50 possuem um termo semelhante, $\beta_n \beta_m \tilde{Y} (1 - \tilde{Y}^2)$, o que permite efetuar a subtração de B.49 em B.50, resultando na relação expressa por:

$$\beta_n \frac{d}{d\tilde{Y}} \left(\tilde{Y} \frac{d\beta_m}{d\tilde{Y}} \right) - \beta_m \frac{d}{d\tilde{Y}} \left(\tilde{Y} \frac{d\beta_n}{d\tilde{Y}} \right) = (\lambda_n^2 - \lambda_m^2) (1 - \tilde{Y}^2) \tilde{Y} \beta_n \beta_m \quad (\text{B.51})$$

O lado esquerdo de B.51 pode ser reagrupado e integrando ambos os lados em relação ao intervalo \tilde{Y} de $[0,1]$, obtem-se a relação expressa pela por

$$\int_0^1 \frac{d}{d\tilde{Y}} \left[\tilde{Y} \left(\beta_n \frac{d\beta_m}{d\tilde{Y}} - \beta_m \frac{d\beta_n}{d\tilde{Y}} \right) \right] d\tilde{Y} = \int_0^1 (\lambda_n^2 - \lambda_m^2) (1 - \tilde{Y}^2) \tilde{Y} \beta_n \beta_m d\tilde{Y} \quad (\text{B.52})$$

que pode ser ajustada sobre a forma de:

$$(\lambda_n^2 - \lambda_m^2) \int_0^1 \beta_n \beta_m \tilde{Y} (1 - \tilde{Y}^2) d\tilde{Y} = \tilde{Y} \left(\beta_n \frac{d\beta_m}{d\tilde{Y}} - \beta_m \frac{d\beta_n}{d\tilde{Y}} \right) \Big|_0^1 \quad (\text{B.53})$$

Aplicando-se a condição de contorno na parede tanto em n quanto em m , tem-se que $\beta_n(1) = \beta_m(1) = 0$. Logo B.53 é simplificada para relação:

$$\int_0^1 \beta_n \beta_m (\tilde{Y}) \tilde{Y} (1 - \tilde{Y}^2) d\tilde{Y} = 0, \quad m \neq n \quad (\text{B.54})$$

A relação B.54 claramente valida a ortogonalidade da solução. Além disso, essa verificação permite também mostrar que a solução para A_n pode ser claramente visualizada aplicando-se a condição na entrada $\tilde{C}(\tilde{Y}, 0) = 1$. Logo, resulta na relação:

$$1 = \sum_{n=0}^{\infty} A_n \beta_n(\tilde{Y}) \quad (\text{B.55})$$

Assim A_n é determinado pela relação B.55 multiplicada por $\beta_m(\tilde{Y})\tilde{Y}(1 - \tilde{Y}^2)$ e integrando em relação ao intervalo \tilde{Y} como na relação de $[0, 1]$ como expresso por:

$$\int_0^1 \beta_m(\tilde{Y})\tilde{Y}(1 - \tilde{Y}^2) d\tilde{Y} = \int_0^1 \sum_{n=0}^{\infty} A_n \beta_n \beta_m(\tilde{Y})\tilde{Y}(1 - \tilde{Y}^2) d\tilde{Y} \quad (\text{B.56})$$

Para $n = m$ tem-se que claramente o termo A_n é descrito pela equação:

$$A_n = \frac{\int_0^1 \beta_n(\tilde{Y})\tilde{Y}(1 - \tilde{Y}^2) d\tilde{Y}}{\int_0^1 [\beta_n(\tilde{Y})]^2 \tilde{Y}(1 - \tilde{Y}^2) d\tilde{Y}} \quad (\text{B.57})$$

Usando a expressão B.47 para se encontrar o numerador, integrando $[0, 1]$, facilmente verifica-se que o numerador do termo A_n é dado pela relação:

$$\int_0^1 \beta_n \tilde{Y}(1 - \tilde{Y}^2) d\tilde{Y} = \frac{-1}{\lambda_n^2} \left(\frac{d\beta_n}{d\tilde{Y}} \right)_{\tilde{Y}=1} \quad (\text{B.58})$$

Já para o denominador, a relação pode ser obtida aplicando-se a relação expressa em B.53, e aplicando-se o limite quando $\lambda_m \rightarrow \lambda_n$ como expresso em:

$$\lim_{\lambda_m \rightarrow \lambda_n} \int_0^1 \beta_n \beta_m \tilde{Y}(1 - \tilde{Y}^2) d\tilde{Y} = \lim_{\lambda_m \rightarrow \lambda_n} \frac{\tilde{Y} \left(\beta_n \frac{d\beta_m}{d\tilde{Y}} - \beta_m \frac{d\beta_n}{d\tilde{Y}} \right) \Big|_0^1}{(\lambda_n^2 - \lambda_m^2)} \quad (\text{B.59})$$

Nota-se que o resultado de B.59 é uma indeterminação do tipo $(0/0)$ e aplicando-se a regra de L'Hospital é possível se obter a relação:

$$\lim_{\lambda_m \rightarrow \lambda_n} \frac{\tilde{Y} \left(\beta_n \frac{d}{d\lambda_m} \frac{d\beta_m}{d\tilde{Y}} - \frac{d\beta_m}{d\lambda_m} \frac{d\beta_n}{d\tilde{Y}} \right) \Big|_0^1}{-2\lambda_m} \quad (\text{B.60})$$

Usando-se que $\beta_n(1) = \beta_m(1) = 0$ simplifica-se para:

$$\lim_{\lambda_m \rightarrow \lambda_n} \frac{\left(-\frac{d\beta_m}{d\lambda_m} \frac{d\beta_n}{d\tilde{Y}} \right) \Big|_{\tilde{Y}=1}}{-2\lambda_m} = \frac{1}{2\lambda_n} \left(\frac{d\beta_m}{d\lambda_m} \frac{d\beta_n}{d\tilde{Y}} \right)_{\lambda_m=\lambda_n, \tilde{Y}=1} \quad (\text{B.61})$$

Associando B.58 e B.61, é possível obter-se uma expressão direta para cálculo do termo A_n , expressa por:

$$A_n = -\frac{2}{\lambda_n \left(\frac{d\beta_m}{d\lambda_m} \right)_{m=n \text{ e } \tilde{Y}=1}} \quad (\text{B.62})$$

APÊNDICE C – CÓDIGOS COMPUTACIONAIS

A seguir apresentam-se os códigos desenvolvidos e que foram base para a obtenção das soluções analítica e numérica. Os códigos são disponibilizados para que possam ser replicados. Para rodar cada código eventuais alterações podem ser necessárias em algumas variáveis como: o intervalo de iteração, o número de elementos para truncamento da série da solução analítica e o número de pontos amostrados.

C.1 CÓDIGOS DA SOLUÇÃO ANALÍTICA

C.1.1 Verificando valores de Lambdas

O primeiro passo foi desenvolver um código-fonte que retorna os valores de λ_n conforme segue. O código fornece os valores da soma e dos lambdas para o intervalo de interesse, sendo que nem todos os valores são necessariamente lambdas da solução (os mais próximos de 0), tudo vai depender da precisão e do truncamento adotado.

```

1 from math import exp;from mpmath import hyp1f1;from numpy import zeros,
  range
2 def Serie_Frob(k, Lamb):
3     Gz_1 = zeros((k+1),dtype=float)
4     Gz_1[0]= 1;Gz_1[1]= -((Lamb)**2)/(2**2)
5     for i in range(2, k+1):
6         Gz_1[i]= (((Lamb)**2)/((2*i)**2))*(Gz_1[i-2] - Gz_1[i-1]))
7     s = 0
8     for i in range(k+1):
9         s += Gz_1[i]
10    res = abs(s)
11    return res
12 k=200;ini=0;fim=100;passo_loop=1;passo=0.00001;aux=Serie_Frob(200,0)
13 for i in range(ini, fim+passo_loop, passo_loop):
14     for j in range(i,i+passo_loop, passo):
15         s = Serie_Frob(200, j)
16         if s < aux:
17             aux = s;menor_s = s;aux_lamb = j
18     aux = Serie_Frob(200, 0)
19     print ("%9.5e"%menor_s,"%9.5f"%aux_lamb)

```

```

20 from math import exp;from mpmath import hyp1f1;from numpy import arange;
21 def Serie_por_Wittaker(Lamb):
22     a = (2 - Lamb)/4;b = 1;z=(Lamb)
23     M = (hyp1f1(a, b, z))
24     Gz = ((Lamb**(1/2))*(exp(-z/2))*(M))
25     res = abs(Gz)
26     return res
27 ini = 0;fim = 300;passo_loop = 1;passo = 0.00001;aux=Serie_por_Wittaker(0)
28 for i in range(ini, fim+passo_loop, passo_loop):
29     for j in range(i,i+passo_loop, passo):
30         s = Serie_por_Wittaker(j)
31         if s < aux:
32             aux = s; menor_s = s; aux_lamb = j
33     aux = Serie_por_Wittaker(0)
34     print ("%9.5e"%menor_s,"%9.5f"%aux_lamb)

```

```

35 from math import exp; from mpmath import hyp1f1; from numpy import arange
36 def Serie_NEW_ODE(Lamb):
37     a = (2 + Lamb)/4; b = 1; z = -(Lamb)
38     M = (hyp1f1(a, b, z))
39     Gz_NEW_ODE = ((exp(-z/2))*(M))
40     res = abs(Gz_NEW_ODE)
41     return res
42 ini = 0; fim = 300; passo_loop = 1; passo = 0.00001; aux = Serie_NEW_ODE(0)
43 for i in arange(ini, fim+passo_loop, passo_loop):
44     for j in arange(i, i+passo_loop, passo):
45         s = Serie_NEW_ODE(j)
46         if s < aux:
47             aux = s; menor_s = s; aux_lamb = j
48     aux = Serie_NEW_ODE(0)
49     print ("%9.5e"%menor_s, "%9.5f"%aux_lamb)

```

C.1.2 Cálculo do coeficiente A_n

```

50 from math import exp; from mpmath import hyp1f1; from numpy import arange,
    zeros
51
52 def calc_AN_Whittaker(Lamb, h): #Calcula  $A_n$  por Whittaker
53     a1 = (2 - (Lamb+h))/4; b1 = 1; z1 = (Lamb+h)
54     M1 = (hyp1f1(a1, b1, z1))
55     Gz1 = (((Lamb+h)**(1/2))*(exp(-z1/2))*(M1))
56     a2 = (2 - (Lamb-h))/4; b2 = 1; z2 = (Lamb-h)
57     M2 = (hyp1f1(a2, b2, z2))
58     Gz2 = (((Lamb-h)**(1/2))*(exp(-z2/2))*(M2))
59     aux = (Gz1 - Gz2)/(2*h)
60     a_n = (-2/Lamb)*(1/aux)
61     return a_n
62
63 def calc_AN_New(Lamb, h): #Calcula  $A_n$  pela nova proposição
64     a1 = (2 + (Lamb+h))/4; b1 = 1; z1 = -(Lamb+h)
65     M1 = (hyp1f1(a1, b1, z1))
66     Gz1 = ((exp(-z1/2))*(M1))
67     a2 = (2 + (Lamb-h))/4; b2 = 1; z2 = -(Lamb-h)
68     M2 = (hyp1f1(a2, b2, z2))
69     Gz2 = ((exp(-z2/2))*(M2))
70     aux = (Gz1 - Gz2)/(2*h)
71     a_n = (-2/Lamb)*(1/aux)
72     return a_n
73
74 def calc_AN_frob(k, Lamb, h): #Calcula  $A_n$  por Frobenius
75     Gz_1 = zeros((k+1), dtype=float)
76     Gz_1[0] = 1
77     Gz_1[1] = -((Lamb+h)**2)/(2**2)
78     for i in range(2, k+1):
79         Gz_1[i] = (((Lamb+h)**2)/((2*i)**2))*(Gz_1[i-2] - Gz_1[i-1])
80     Gz_2 = zeros((k+1), dtype=float)
81     Gz_2[0] = 1; Gz_2[1] = -((Lamb-h)**2)/(2**2)
82     for i in range(2, k+1):
83         Gz_2[i] = (((Lamb-h)**2)/((2*i)**2))*(Gz_2[i-2] - Gz_2[i-1])
84     s_1 = 0; s_2 = 0
85     for i in range(k+1):
86         s_1 += Gz_1[i]; s_2 += Gz_2[i]
87     aux = (s_1 - s_2)/(2*h); a_n = (-2/Lamb)*(1/aux)
88     return a_n

```

C.1.3 Cálculo da concentração

```

88 #Função para cálculo com Whittaker
89 def Solucao_Whittaker(Lamb, a_n, Y, Z):
90     a = (2 - Lamb)/4
91     b = 1
92     z = (Lamb)*(Y**(2))
93     M = hyp1f1(a, b, z)
94     Gz = (exp(-(z)/2))*(M)
95     C = (a_n)*(Lamb**(1/2))*(Gz)*(exp(-(Lamb**2)*Z))
96     return C
97 #Função para Cálculo com Nova ODE
98 def Solucao_Nova(Lamb, a_n, Y, Z):
99     a = (2 + Lamb)/4
100    b = 1
101    z = -(Lamb)*(Y**(2))
102    M = hyp1f1(a, b, z)
103    Gz = (exp(-(z)/2))*(M)
104    C = (a_n)*(Gz)*(exp(-(Lamb**2)*Z))
105    return C
106 #Função para Cálculo por Frobenius
107 def Solucao_Frobenius(k, Lamb, A_n, Y, Z):
108     Gz = zeros((k+1),float)
109     Gz[0]= 1
110     Gz[1]= -((Lamb)**2)/(2**2)
111     for i in range(2, k+1):
112         Gz[i]= (((Lamb)**2)/((2*i)**2))*(Gz[i-2] - Gz[i-1])
113     Gz_n = zeros((k+1),float)
114     for i in range(k+1):
115         Gz_n[i]= ((Gz[i])*(Y**(2*i)))
116     C = zeros((k+1),float)
117     for i in range(k+1):
118         C[i]= (A_n)*(Gz_n[i])*(exp(-(Lamb)**2)*Z))
119     s = 0
120     for i in range(len(C)):
121         s += C[i]
122     return s

```

C.2 CÓDIGO DA SOLUÇÃO NUMÉRICA - GERAL

```

123 from numpy import zeros, arange, shape, mean
124 import matplotlib.pyplot as plt; import copy
125 def TDMA(a,b,c,d): #Algoritmo TDMA
126     A = copy.deepcopy(a); B = copy.deepcopy(b); C = copy.deepcopy(c)
127     D = copy.deepcopy(d)
128     n=shape(A)[0]; X=zeros(n)
129     C[0]=C[0]/b[0]
130     for i in range(1,n-1):
131         C[i]=C[i]/(B[i]-A[i]*C[i-1])
132     D[0]=D[0]/B[0]
133     for i in range(1,n):
134         D[i]=(D[i]-A[i]*D[i-1])/(B[i]-A[i]*C[i-1])
135     X[n-1]=D[n-1]
136     for i in range(n-2,-1,-1):
137         X[i]=D[i]-C[i]*X[i+1]
138     return X

```

```

139 #Solução Numérica com definição do tamanho da manha (h,k)
140 Z = 1.0;Y = 1.0;h = 0.01;k = 0.0001;
141 ny = int(round(Z/h,0));nz = int(round(Y/k,0))
142 Y_i = arange(0, Y+h, h);Z_i = arange(0, Z+k, k)
143 A = zeros((ny),float);B = zeros((ny),float);C = zeros((ny),float)
144 d_1 = zeros((ny),float);d_2 = zeros((ny),float);d_3 = zeros((ny),float)
145 A[0] = 0.0
146 B[0] = -(1/(h**2))-((1-(Y_i[0]**2))/k)
147 C[0] = (1/(h**2))
148 d_1[0] = 0.0
149 d_2[0] = (1/(h**2))-((1-(Y_i[0]**2))/k)
150 d_3[0] = -(1/(h**2))
151 A[ny-1] = (1/(2*(h**2))) - (1/(4*h*Y_i[ny-1]))
152 B[ny-1] = -(1/(h**2)) - ((1-(Y_i[ny-1]**2))/k)
153 C[ny-1] = 0.0
154 d_1[ny-1] = -(1/(2*(h**2))) + (1/(4*h*Y_i[ny-1]))
155 d_2[ny-1] = (1/(h**2)) - ((1-(Y_i[ny-1]**2))/k)
156 d_3[ny-1] = 0.0
157 for m in range(1,ny-1):#C_i-1
158     A[m] = (1/(2*(h**2))) - (1/(4*h*Y_i[m]))
159 for m in range(1,ny-1):#C_i
160     B[m] = -(1/(h**2)) - ((1-(Y_i[m]**2))/k)
161 for m in range(1,ny-1):#C_i+1
162     C[m] = (1/(2*(h**2))) + (1/(4*h*Y_i[m]))
163 for m in range(1,ny-1):#C_i-1
164     d_1[m] = -(1/(2*(h**2))) + (1/(4*h*Y_i[m]))
165 for m in range(1,ny-1):#C_i
166     d_2[m] = (1/(h**2)) - ((1-(Y_i[m]**2))/k)
167 for m in range(1,ny-1):#C_i+1
168     d_3[m] = -(1/(2*(h**2))) - (1/(4*h*Y_i[m]))
169 old = 0;new = 1
170 Conc = zeros((2,ny+1), float)
171 for m in range(0,ny+1):
172     Conc[0,m] = 1.0
173 Matriz_Conc = zeros((nz+1,ny+1), float)
174 Matriz_Conc[0,0:ny+1] = Conc[0]
175 D = zeros((ny),float)
176 D[0] = (d_2[0])*Matriz_Conc[0,0] + (d_3[0])*Matriz_Conc[0,1]
177 D[ny-1] = (d_1[ny-1])*Matriz_Conc[0,ny-1] + (d_2[ny-1])*Matriz_Conc[0,ny]
178 for s in range(1,ny-1):
179     D[s] = (d_1[s])*Matriz_Conc[0,s-1] + (d_2[s])*Matriz_Conc[0,s] +
180         (d_3[s])*Matriz_Conc[0,s+1]
181 Matriz_Conc[1,0:ny]= TDMA(A,B,C,D)
182 for n in range(1,nz):
183     D = zeros((ny),float)
184     D[0] = (d_2[0])*Matriz_Conc[n,0] + (d_3[0])*Matriz_Conc[n,1]
185     D[ny-1] = (d_1[ny-1])*Matriz_Conc[n,ny-2] +
186         (d_2[ny-1])*Matriz_Conc[n,ny-1]
187     for s in range(1,ny-1):
188         D[s] = (d_1[s])*Matriz_Conc[n,s-1] + (d_2[s])*Matriz_Conc[n,s] +
189             (d_3[s])*Matriz_Conc[n,s+1]
190     Matriz_Conc[n+1,0:ny]=TDMA(A,B,C,D)

```